



Transferts complexes en milieu poreux : Quelques approches physiques et numériques

Pascal Maugis

► To cite this version:

Pascal Maugis. Transferts complexes en milieu poreux : Quelques approches physiques et numériques. Hydrologie. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2006. Français. NNT : . tel-00090023

HAL Id: tel-00090023

<https://theses.hal.science/tel-00090023>

Submitted on 25 Aug 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ PARIS 6 - PIERRE ET MARIE CURIE

U.F.R. D'ÉLECTRONIQUE, ÉLECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE ET
APPLICATIONS DE LA PHYSIQUE

Doctorat

Géosciences et ressources naturelles

PASCAL MAUGIS

TRANSFERTS COMPLEXES EN MILIEU POREUX :

QUELQUES APPROCHES PHYSIQUES ET
NUMÉRIQUES

Thèse dirigée par G. de Marsily et F. Delay

soutenue le 30 juin 2006

Jury :

M. Philippe Ackerer	(IMFS)	Rapporteur
M. Benoît Nøtinger	(IFP, Paris VI)	Rapporteur
M. Daniel Fargue	(ENSMP)	Examinateur
M. Michel Quintard	(IMFT)	Examinateur
M. Dominique Salin	(Paris VI)	Examinateur
M. Emmanuel Mouche	(CEA)	Invité

Exode, 17 :6

L'Éternel dit à Moïse :

“Tu frapperas le rocher, l'eau en sortira et le peuple boira.”

Résumé Général

La modélisation hydrogéologique est un outil puissant de compréhension de nombreux processus mettant en jeu le transport d'eau et de matière en milieu poreux souterrain. La problématique du devenir du combustible nucléaire en fin de cycle, à forte activité radiologique et à longue durée de vie, a donné de l'élan à la recherche sur cette thématique. L'objectif de la recherche est de montrer, grâce à la modélisation, la faisabilité et la sûreté de différents scénarios comme le stockage quasi-définitif de milliers de conteneurs dans de vastes réseaux de galeries souterraines, creusées dans des couches géologiques profondes et peu perméables, ou leur entreposage sur quelques siècles dans des sites plus proches de la surface en attendant de leur trouver un usage ou une fin plus définitive.

Dans ce contexte, ce rapport de thèse retrace quelques unes des approches complexes mises en œuvre dans la modélisation de processus élémentaires concourant au transport d'eau et de polluant en milieu poreux. La complexité est envisagée dans les processus mis en jeu, dans la structure du milieu et dans les méthodes numériques déployées.

Thermo-hydraulique

La physique complexe de l'écoulement diphasique eau/air, couplé à la thermique, est exposée théoriquement en partie I, à l'aide d'un modèle thermodynamique après avoir précisé et critiqué quelques concepts comme le potentiel de l'eau, la charge hydraulique d'une phase gazeuse, la pression capillaire, la loi de Fick, l'osmose, etc. Un modèle numérique simplifié à trois équations de conservation (eau, air, et enthalpie) est exposé, y compris dans sa dégénérescence à un seul constituant ou une seule phase. Il est mis en œuvre pour simuler le fonctionnement d'un dispositif expérimental, appelé MASCILIA, reproduisant dans son principe l'entreposage géologique d'un container de déchets radioactifs de haute activité. Il consiste en un chauffage localisé d'un bac de sable rempli d'eau, et le suivi du développement d'une "bulle" de vapeur. On montre comment s'entretient un échange de chaleur par effet caloduc à l'interface de cette bulle et du milieu poreux encore saturé d'eau.

Milieus hétérogènes

La complexité peut aussi découler de l'hétérogénéité du milieu poreux. La Méthode de Monte-Carlo permet de générer des réalisations de milieux aléatoires connaissant leur structure statistique. On applique cette méthode, en partie II, à des milieux sédimentaires (non fracturés) afin, par l'intermédiaire de modèles stochastiques, de comprendre l'impact des hétérogénéités sur la réponse d'un milieu naturel à diverses sollicitations. L'influence de la proximité, en 2D, de frontières déterministes (comme des conditions aux limites) sur la structure statistique des grandeurs associées à l'écoulement et au transport a été caractérisée (chapitre 2). Elle peut être très importante, tant sur la charge hydraulique et la vitesse de Darcy que sur l'étalement longitudinal ou transversal d'un panache de traceur. Ces effets sont sensibles également à la nature (charge ou flux) de la condition imposée aux limites. On met en évidence numériquement ces particularités et on en démontre une partie théoriquement. Cette analyse est importante pour l'interrogation numérique du concept de dispersivité.

La dispersivité est une mesure de l'étalement de type diffusif d'un panache au fil du temps. Son intérêt est mis à l'épreuve au chapitre 3, avec la même méthodologie que précédemment, d'écoulements moyens non uniformes (tournant, radial convergeant vers un puits, dipolaire entre deux puits). Elle s'avère dépendre étroitement du type d'écoulement et n'est donc pas une caractéristique intrinsèque au milieu poreux. De plus, elle ne rend compte que de la partie gaussienne de l'étalement spatial des panaches, quand précisément cet étalement est en réalité fortement dissymétrique en présence de puits. L'existence d'une telle singularité de l'écoulement a pour conséquence que la dispersivité n'atteint pas de valeur asymptotique. Ainsi, tout calage d'une dispersivité sur la base d'essais de traçage entre puits est sans rapport avec la réalité des processus dispersifs. Paradoxalement, et dans le cas précis d'un seul puits de pompage, il se trouve toutefois que la dispersivité calée rend bien compte de la dispersivité que le milieu exhiberait si l'écoulement était uniforme.

Transport particulaire

Ces études numériques s'appuient sur le développement de méthodes sophistiquées de résolution d'équations d'écoulement et de transport. On détaille ainsi, chapitre 4, un algorithme de transport particulaire avec convection, diffusion et dispersion. Aux sauts élémentaires de convection s'ajoutent des sauts aléatoires (bruit blanc) engendrant de la diffusion. C'est le principe de la marche aléatoire. L'originalité de l'algorithme réside dans la localité des sauts, que l'on limite à chaque maille par calage du pas de temps en résolvant une équation du second degré en $\sqrt{\Delta t}$. On évite ainsi un léger biais positif sur les sauts diffusifs entre mailles.

Géochimie simplifiée

On aborde enfin au chapitre 5, en l'illustrant sur un cas-test, la modélisation du transport d'espèces disparaissant par décroissance radioactive, pouvant aussi être dissoutes, adsorbées ou précipitées. Cette situation, mathématiquement fort générale, se rencontre notamment lors de la lixiviation de la matrice d'oxyde d'uranium constituant les barres de combustible nucléaire, lorsque l'eau souterraine a achevé de corroder les conteneurs. On compare plusieurs algorithmes calculant, par point fixe, l'équilibre de dissolution dont la cinétique peut être au choix instantanée, linéaire ou imposée. Les critères de stabilité et de précision sont exposés, ainsi que les manières de les satisfaire ou de les contourner. Des effets indésirables de sur-précipitation amont ou de concentration négative en aval des fronts de précipitation surviennent lorsque les contrastes de solubilité sont importants.

Mots-clefs

Hydrogéologie, Thermo-Hydraulique, Modélisation Stochastique, Dispersivité, Transport Particulaire, Précipitation / Dissolution.

Remerciements

Faire état de ma gratitude et de mon plaisir d'avoir travaillé, pendant huit années, sur cet ensemble éclectique de projets pourrait se révéler fastidieux. Les collaborations furent nombreuses, et les personnes apparaissant pour une période déterminées (stagiaires, thésards, prestataires, ...) moult. Autant que cela fut possible, les relations ont été le plus souvent cordiales voire chaleureuses. Et j'ai autant appris humainement et scientifiquement de ces contacts avec les plus jeunes, comme avec les plus expérimentés, dans les périodes d'entente comme dans les riches périodes de conflit. Et oui. Je remercie ici, globalement et à égalité, mes compagnons, collaborateurs et détracteurs qui ont tous contribué, à leur manière, à mon travail et à mon cheminement.

A tout seigneur, tout honneur. Je me dois de citer quelques individualités qui ont particulièrement marqué cette période. A commencer par M. Combescure, alors chef de service et professeur d'option dans mon école, qui m'a obtenu mes premiers stages au CEA. De M. Jean Gauvain qui m'y a embauché, je salue le courage, la conscience professionnelle et l'amitié de ces premières années. Bien évidemment, celui qui m'a supervisé ensuite et jusqu'à maintenant dans l'essentiel de ma carrière, Emmanuel Mouche, mérite ma gratitude sincère ainsi que mes vœux de courage et d'obstination dans la poursuite de ce qui semble ne pas être une sinécure.

A mon compagnon de voyage, Christophe Grenier, je renouvelle mon amitié. Le partage des bons comme des mauvais moments a été un accompagnement profitable que j'espère réciproque. A trois, on forme déjà un groupe !

A la liste nécessairement longue de tout ceux qui ont participé à mon travail, et à ma vie professionnelle : administratifs, (nombreux) chefs, collaborateurs distants ou collègues du laboratoire et du service, je tiens à faire part de mon attachement plus spécifiquement à Frédéric Dabbène, Stéphane Gounand, Gilles Bernard-Michel, Alberto Beccantini, tous brillants chercheurs assurément – ou du moins à mes yeux – pour leur amitié, leur aide, leur compétence et leur esprit de partage. J'y adjoins mes ex-collègues du MTMS : C. Le Potier, Ph. Montarnal ..., et ceux et celles qui sont maintenant au LTMF : A. Stietel, N. Coulomb, H. Paillère, le célèbre Jean-Paul Magnaud, Arnaud Monavon à la pénétration théorique sans pareille, Eloi treille ... A ceux qui, aujourd'hui, ont pour tâche de cohabiter avec moi au sein de notre nouvelle équipe du LSCE, Claude Mügler, Vanessa Teles, Sylvain Weill, stagiaires, post-doc, CDDs et autres précaires, je renouvelle mon attachement et

mes meilleurs vœux pour l'avenir.

Merci à Cyril Nou pour la qualité des échanges tant humains que scientifiques. Il fut un stagiaire mémorable.

Merci à l'équipe Cast3M : Pierre, Thierry, Alain, Joël, Antoine dont la contribution et la collaboration, parfois mouvementées, ont été, finalement, constructives et amicales, et que j'espère prolonger. Je rend hommage aux prestataires trop souvent anonymes qui ont contribué patiemment au déploiement de l'outil : Grégory Turbelin et Stéphane Tolla. Que leurs noms ne soient pas oubliés. Merci à Christophe Dellis pour son action bienveillante.

La plupart des travaux scientifiques présentés ici ont été financés par l'ANDRA, et doivent en partie leur existence à l'intérêt et la promotion de personnalités comme Lionel Dewière, maintenant à l'IRSN.

Pour leur travail de relecture et leurs encouragements, je suis reconnaissant envers mes deux co-directeurs de thèse, M. de Marsily et M. Delay, qui, au milieu de leurs nombreuses obligations, ont trouvé du temps pour me conseiller et me permettre de briguer le titre si convoité de chercheur patenté.

Bien entendu, et c'est sans doute le plus important, j'exprime ma reconnaissance et mon amour à ma femme Josiane et mes enfants Alliance et Gabriel, qui m'ont, chacun à leur manière, encouragé dans mes choix, et me soutiennent à chaque instant avec constance et affection.

Table des matières

Résumé Général	5
Remerciements	7
Table des matières	9
Liste des figures	11
Introduction Générale	15
I Transferts à physique complexe	21
1 Établissement d'un modèle thermo-hydraulique	23
Résumé	23
Introduction	24
1.1 Présentation du modèle thermo-hydraulique	27
1.1.1 Deux constituants eau - air sec	28
1.1.2 Dégénérescence du système d'équation sans air	55
1.2 Modèle numérique	57
1.2.1 Algorithme de résolution	57
1.2.2 Prise en compte de la disparition d'une phase	58
1.2.3 Prise en compte de conditions aux limites de flux	62
1.2.4 Calcul des termes sources croisés	62
1.2.5 Calcul a posteriori des flux	65
1.2.6 Établissement de conditions initiales	66
1.3 Application à la maquette MASCILIA	67
1.3.1 Principe de la maquette	67
1.3.2 Données physiques et numériques, maillage	68
1.3.3 Résultats et commentaires	72
1.3.4 Comparaison expérimentale	78
Conclusion	79

II	Transferts en milieux complexes	83
	Introduction	85
2	Effet de conditions aux limites sur une modélisation stochastique	89
	Résumé	89
	Introduction	89
	2.1 Principe de la simulation	92
	2.2 Effet de conditions aux limites déterministes sur l'écoulement	94
	2.2.1 Effet des conditions aux limites sur la charge	94
	2.2.2 Effet des conditions aux limites sur la vitesse	99
	2.2.3 Conclusion	104
	2.2.4 Justification théorique	105
	2.3 Impact sur le transport de conditions aux limites déterministes	114
	2.3.1 Rappel des résultats du modèle linéarisé	115
	2.3.2 Influence sur la variance de position longitudinale	116
	2.3.3 Influence sur la variance de position transverse	118
	2.3.4 Conclusion	119
	Conclusion	121
3	Dispersivité en milieu poreux en écoulement non uniforme	123
	Résumé	123
	Introduction	123
	3.1 Contexte théorique : l'approche par séparation d'échelles	125
	3.1.1 En écoulement uniforme	127
	3.1.2 À l'ordre zéro de la séparation d'échelle	127
	3.1.3 À l'ordre un de la séparation d'échelle	130
	3.2 Résultats numériques	135
	3.2.1 Cadre numérique	135
	3.2.2 Simulation en écoulement tournant sans recharge	135
	3.2.3 Simulation en écoulement radial convergent	142
	3.2.4 Simulation en écoulement dipolaire	146
	Conclusion	150
III	Algorithmes et méthodes numériques	153
4	Modélisation numérique particulière de convection-dispersion	155
	Préambule	155
	Résumé	155
	Introduction	156
	4.1 Présentation et implémentation du modèle	157
	4.1.1 Algorithme général convection-diffusion particulière	157
	4.1.2 Trajectoire au sein d'un même élément	157
	4.1.3 Trajectoire entre deux éléments	162

4.1.4	Trajectoire aux abords de limites imperméables	162
4.1.5	Traitement des cas particuliers	163
4.1.6	Conclusion	165
4.2	Validation du modèle au regard de solutions analytiques	166
4.2.1	Statistiques théoriques du transport en écoulement uniforme .	166
4.2.2	Validation de la convection pure	167
4.2.3	Validation de la diffusion pure	169
4.2.4	Validation des phénomènes de convection-dispersion-diffusion .	170
4.3	Autres applications à intérêt qualitatif	177
4.3.1	Limite imperméable	178
4.3.2	Accumulation de particules sous diffusion non uniforme	179
4.3.3	Cas d'un pompage sous gradient naturel	183
4.3.4	Influence des noeuds du maillage	184
	Conclusion	184
5	Modélisation numérique de précipitation/dissolution d'un composé chimique	185
	Introduction	185
	Notation	188
5.1	Physique du transport d'un radioélément avec géochimie simple . . .	189
5.1.1	Rappels et définitions	190
5.2	Modélisation du transport	192
5.2.1	Équations prises en compte	192
5.2.2	Transcription numérique	193
5.2.3	Limites de la modélisation	218
	Conclusion	224
	Conclusion Générale	227
	Références	232
	Articles publiés	243

Table des figures

1	Stockage profond en formation géologique, effets en champ proche . .	17
1.1	Matrice d'Onsager déclinées pour quatre classes de processus physiques	33
1.2	Variation pression différentielle de sorption, capillaire et rétention . .	36
1.3	Diagramme de phase de l'eau perturbé par la pression capillaire. . .	47
1.4	Pressions et pressions étendues	59
1.5	Schéma de principe de la maquette MASCILIA (coupe 2D).	67
1.6	Perméabilités relatives et loi capillaire du sable.	69
1.7	Maillages utilisés dans les modélisations 2D et 3D de MASCILIA . .	71
1.8	Variables principales et saturation sans flux d'entrée	73
1.9	Flux d'eau et de chaleur en fonction du temps et de l'espace, 10 l/h .	75
1.10	Évolutions au cours du temps. Flux d'entrée = 10 l/h	76
1.11	Mise en évidence de l'effet Caloduc	81
1.12	Comparaison expérimentale des profils de température	82
1.13	Protocoles de test de traçage en fracture isolée	86
2.1	Équivalence entre deux systèmes de conditions aux limites	90
2.2	Quelques définitions du domaine d'étude	93
2.3	Les quatre types de conditions aux limites considérés.	93
2.4	Évolution de l'écart-type de charge normalisé	95
2.5	Écart-type de charge normalisé entre deux CLs longitudinales de charge	96
2.6	Évolution de la moyenne de vitesse longitudinale	99
2.7	Évolution de la variance de vitesse longitudinale	100
2.8	Évolution de la variance de vitesse transverse	101
2.9	Évolution de l'étalement d'un panache sous l'effet de différentes CLs .	117
2.10	Impact sur l'étalement longitudinal de la proximité du point de lâcher	118
2.11	Évolution de l'étalement transverse en fonction de σ_y	119
2.12	Impact sur l'étalement d'un panache de l'éloignement des CLs	120
3.1	Représentation de l'ordre zéro de séparation d'échelle	129
3.2	Schémas des trois types d'écoulement envisagés	131
3.3	Panaches de particules en écoulement progressivement tournants . .	136
3.4	Propriétés statistiques du transport en écoulement quasi-uniforme . .	137
3.5	Propriétés statistiques du transport en écoulement tournant	138
3.6	Propriétés statistiques du transport en écoulement fortement tournant	139

3.7	Panaches de particules en milieu hétérogène en présence de puits . . .	143
3.8	Statistiques du transport pour un puits ou un dipôle	145
3.9	Distribution du temps d'arrivée d'un panache, deux points de lâcher .	148
4.1	Algorithme du modèle particulaire implémenté	158
4.2	Représentation du transport d'une particule, séparation des processus	159
4.3	Saut de particule au sein d'un élément	160
4.4	Recalibrage de la position de la particule sur une face de l'élément . .	163
4.5	Saut de particule aux abords d'une face imperméable	163
4.6	Que faire lorsque la particule passe par un noeud	164
4.7	Pichenette décisive	164
4.8	Recalibrages successifs du saut de particule sur une face de l'élément	165
4.9	Cas d'un recalibrage du saut de particule en dehors de l'élément . . .	166
4.10	Champ de vitesse 2D circulaire et trajectoires calculées	168
4.11	Trajectoires de particules	170
4.12	Moyenne statistique de position en fonction du temps, 2D grossier . .	170
4.13	Variance statistique de position en fonction du temps, 2D grossier . .	171
4.14	Variance statistique de position en fonction du temps, 2D fin	171
4.15	Moyenne statistique de position en fonction du temps, cas uniforme .	172
4.16	Variance statistique de position en fonction du temps, cas uniforme .	173
4.17	Convergence de la moyenne statistique de position à $t=13s$	173
4.18	Convergence de la variance statistique de position à $t=13s$	174
4.19	Densités de probabilité marginales de position à $t=20s$	175
4.20	Champ de charge et trajectoires calculées pour un pompage	177
4.21	Moyenne statistique de position en fonction du temps; pompage 2D .	177
4.22	Prise en compte de faces imperméables	178
4.23	Vitesse horizontale et trajectoires calculées dans une chicane 2D . . .	179
4.24	Charge et trajectoires sous pompage et gradient naturel	183
5.1	Maillage du cas test	196
5.2	Effet du schéma d'implicitation sur la décroissance calculée	200
5.3	Effet du pas de temps sur la décroissance calculée	211
5.4	Effet du choix de l'algorithme de diss. instantanée - ΔC_{Sat} progressif.	212
5.5	Effet du choix de l'algorithme de diss. instantanée - ΔC_{Sat} brutal. . .	213
5.6	Dissolution à cinétique d'ordre 1, convection et de C_{Sat} exponentiel .	217
5.7	Dissolution à cinétique d'ordre 1, convection et C_{Sat} brutal	217
5.8	Prise en compte de termes sources volumique en EFMH	219
5.9	Apparition de concentrations négatives sur un cas concret	220
5.10	Apparition de C négatives en EFMH avec un terme de puits	220
5.11	Description du mécanisme de reprécipitation amont, en EFMH.	222
5.12	Erreur de bilan, algo. prévision quantité dissoute et ΔC_{Sat} progressif.	222
5.13	Erreur de bilan, algo. indicateur présence précipité et ΔC_{Sat} brutal. .	223

Introduction Générale

L'eau, c'est la vie. L'organisation humaine et l'écosystème sont étroitement assujettis à sa disponibilité et à sa qualité. Cette ressource partiellement renouvelable doit donc être épargnée, protégée, et gérée au mieux. L'hydrogéologie constitue, au côté de l'hydrologie, de l'économie, et de bien d'autres disciplines, une pièce maîtresse à cet égard.

La modélisation hydrogéologique comme outil de prévention

La modélisation appuie efficacement les sciences hydrologiques pour au moins deux raisons : (i) les temps caractéristiques de certains processus (diffusivité hydraulique) sont souvent démesurés par rapport à une vie humaine, ce qui rend leur étude expérimentale directe impossible, et (ii) les mesures de terrain (type carottages, piézométrie, mesure de perméabilité, tests de traçage) sont coûteuses, donc peu nombreuses et par conséquent faiblement représentatives. Aussi doit-on se reposer sur des modèles, le plus souvent numériques, capables de critiquer et d'interpoler les données accessibles, pour se faire une idée de l'évolution des systèmes hydrogéologiques à l'échelle du siècle, du millénaire ou même du million d'années. La modélisation permet bien entendu – mais ce sont des qualités qui ne sont pas propres à la thématique abordée – de tester différents scénarios, et, plus généralement, de convoquer virtuellement toutes sortes de situations imaginables, mais difficiles ou impossibles à transposer matériellement.

La modélisation hydrogéologique quantitative est toutefois confrontée à des difficultés importantes :

(1) Tout d'abord, il convient de connaître la physique des phénomènes dominants dans le milieu poreux et d'être capable de l'écrire sous forme d'équations. La loi de Darcy, simple règle de proportionnalité entre un débit et un différentiel de charge hydraulique, permet d'aborder en gros la plupart des problèmes d'écoulement des fluides. Mais elle s'avère rapidement insuffisante dès lors que des phénomènes fins entrent en jeu. Les parties I et II de ce document traiteront quelques éléments de cette complexité.

(2) Les équations physiques font ensuite l'objet d'une écriture numérique. L'abondance de publications dans ce domaine témoigne de la difficulté à disposer de méthodes robustes, précises, rapides et transposables pour différentes applications. En effet, chaque nouveau processus, chaque application à un nouveau site, nécessite des

développements propres dictés par une particularité de l'application. Certains de ces aspects sont développés en partie III.

(3) En supposant qu'on dispose d'une méthode numérique efficace dans la modélisation de processus physiques bien cadrés et bien décrits, il reste encore à renseigner le modèle avec une description satisfaisante des propriétés du milieu. Or, le milieu géologique étant par construction caché et difficile d'accès, les données sont le plus souvent de densité insuffisante et doivent être interpolées pour donner des valeurs partout où le modèle l'exige. De nombreux travaux ont été publiés depuis une vingtaine d'années sur l'interpolation et la critique des données expérimentales. La rareté des données en rapport direct avec l'hydrogéologie rend l'utilisation de données indirectes séduisante, mais limitée. L'adéquation des échelles de mesure aux échelles modélisées est également une question récurrente partiellement résolue. On s'en tiendra, afin de ne pas quitter le cadre de cette thèse, à cette courte évocation.

La mise en œuvre de la modélisation dans la problématique de la fin de cycle du combustible nucléaire

L'industrie nucléaire occupe une part dominante dans la production d'électricité de notre pays. Cette particularité mondiale a minimisé l'impact des crises pétrolières sur notre économie. Bien que ce ne fut pas une priorité lors de la conception de la première pile, la question du devenir des déchets nucléaires générés par cette activité est progressivement devenue un enjeu de société. L'ANDRA a été mandatée par l'Etat pour répondre à cette question. C'est dans ce contexte, et en grande partie grâce à leur financement, que les travaux exposés dans ce rapport ont vu le jour. Mon travail a été d'apporter des éléments méthodologiques pour démontrer la faisabilité et la pertinence du concept de stockage et d'entreposage de déchets nucléaires en milieu géologique.

L'ANDRA souhaite connaître le devenir des radioéléments constituant des barres de combustible nucléaire usé, et stockées dans des conteneurs métalliques enfouis profondément sous le sol. Une fois les conteneurs corrodés, l'eau souterraine commence à pénétrer à l'intérieur, et dissout une partie des radioéléments qui passent en solution avant d'être transportés par l'écoulement hydraulique souterrain. Un grand nombre de phénomènes ont lieu sur un tel site. Ils sont d'ordres thermique, mécanique, chimique, hydraulique, radiatif, ... et le plus souvent couplés entre eux. La Figure 1 donne une idée de leur multiplicité. Citons par exemple, sans souci d'exhaustivité :

- (a) Parmi les effets thermiques : l'échauffement dû à l'activité nucléaire résiduelle, l'effet du gradient de température (convection "naturelle" par effet de densité, variation spatiale des équilibres géochimiques, contraintes thermomécaniques), modification des propriétés (mécaniques, chimiques, hydrauliques) du milieu environnant.
- (b) Parmi les effets mécaniques : contraintes mécaniques externes, pression interne des gaz générés, gonflement de la barrière de confinement.

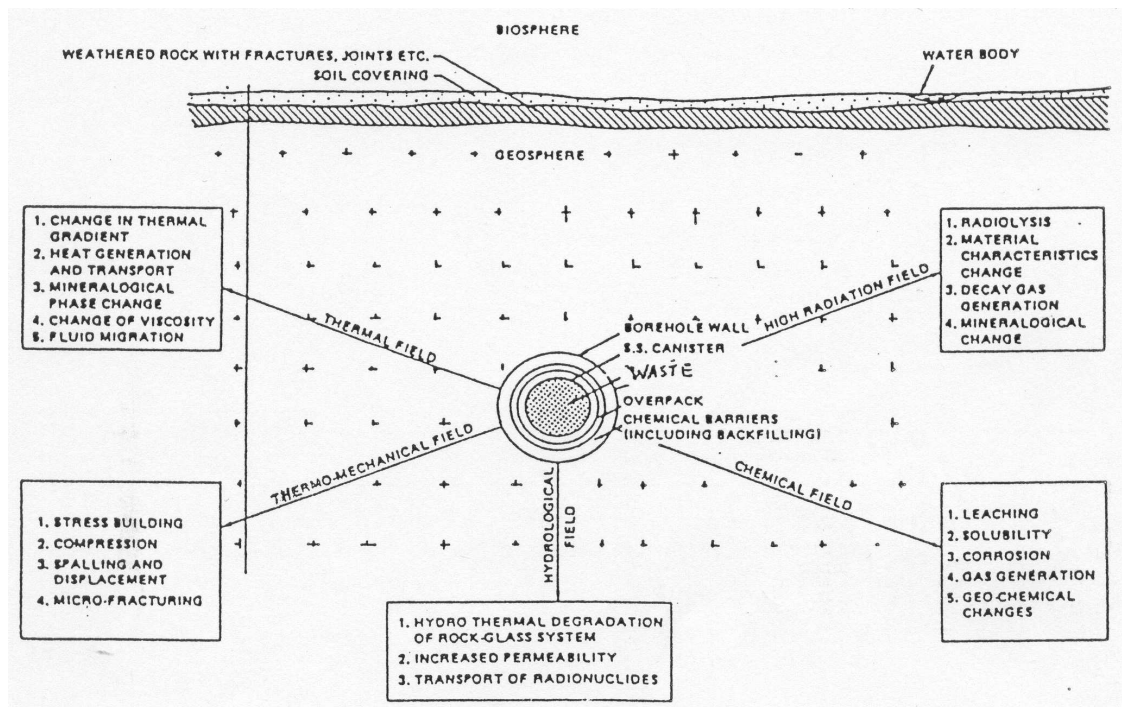


FIG. 1: Stockage profond en formation géologique, effets en champ proche. Typiquement, l'excavation est de l'ordre de quelques mètres, et le champ proche de quelques dizaines de mètres (Rapport CE : Direct disposal of spent nuclear fuel, EUR 11268 EN)

(c) Parmi les effets radiatifs : décroissance et filiation radioactive, radiolyse de l'eau, dégradation radiologique des matériaux de confinement.

(d) Parmi les effets chimiques : réaction en surface de la matrice d'accueil (sorption) ou avec des colloïdes, lixiviation de la matrice et d'autres produits précipités ou libérés par congruence, dissolution de l'activité labile ou intergranulaire, limite de solubilité, corrosion du conteneur (massive ou par piqûre, puis sous contrainte), corrosion bactérienne, équilibre géochimique dépendant du milieu géologique environnant, mais aussi de la variété des matériaux introduits par l'homme dans le béton, le remblais, etc. (pH, potentiel Redox).

(e) Parmi les effets hydrauliques : milieu poreux sédimentaire ou fracturé, écoulement d'eau souterrain, resaturation de la barrière ouvragée, diffusion et entraînement dispersif des produits radioactifs à travers le support aqueux, capture par des colloïdes puis filtration par la matrice.

(f) L'influence de l'environnement : activité bactérienne, changement de climat (succession d'ères glaciaires et érosion, effet d'un réchauffement durable), intrusion humaine ou autre, tremblement de terre, ...

Ainsi, cette problématique pose des questions typiques à la communauté hydrogéologique : Peut-on connaître, avec un niveau de confiance raisonnable, le devenir d'un

panache radioactif distillé lentement par des conteneurs corrodés ? et peut-on garantir que l'accroissement de radioactivité résultant dans l'écosystème sera inoffensif ? De grandes échelles de temps sont impliquées par ce type d'étude car certains radionucléides ont une période radioactive de l'ordre du million d'années, et ils sont placés dans des strates géologiques choisies peu perméables où les écoulements sont très lents. Dans les scénarios favorables, on peut espérer que les plus stables des radioisotopes libérés mettront quelques centaines de milliers d'années avant d'atteindre la surface ou la mer, et qu'alors, leur concentration serait suffisamment faible, autant du fait de la décroissance naturelle que par dilution dans les nappes souterraines.

Quelques approches de modélisation de phénomènes complexes en milieu poreux

Ce document examine un certain nombre de points précis en rapport avec ces difficultés. La complexité de l'approche de modélisation réside dans la complexité des phénomènes physiques mis en jeu, et dans la complexité du milieu naturel en tant que support à un phénomène donné. C'est autour de cette division que s'articule l'exposé. Ainsi, on tentera de mettre au clair, dans la première partie, l'écheveau des processus intervenant à l'échelle du milieu poreux dans les écoulements diphasiques eau-air couplés à la thermique. Le soin sera apporté à l'écriture d'un système d'équations couplées décrivant les processus physiques en jeu, et surtout à la revue et la critique de concepts usuels comme la pression capillaire, la charge hydraulique d'un gaz, les lois de Fick et de Kelvin, etc. Une piste pour traiter numériquement l'épineux problème de la disparition d'une phase sera indiquée, avec une illustration basée sur le dimensionnement d'une maquette expérimentale consistant en un large bac de sable saturé d'eau et chauffé en son centre.

La prise en compte de la complexité du milieu poreux sera exposée en deuxième partie à travers deux exemples. De cette complexité, on ne retiendra ici que l'hétérogénéité du champ de perméabilité. La modélisation stochastique consiste à assimiler la réalité de la répartition spatiale d'une grandeur, à l'une des réalisations possibles d'une variable aléatoire. La perméabilité devient, dans ce cadre, une variable aléatoire K dotée de lois statistiques au premier rang desquelles on trouve la densité de probabilité ponctuelle et la corrélation spatiale. On considère alors que, sous un gradient de charge donné, le mouvement d'une même particule de traceur lâchée dans N réalisations différentes de champs de perméabilité donnera une indication de l'étalement réel d'un panache de nombreuses particules dans un seul champ réel de perméabilité. Cette démarche est justifiée si le processus de dispersion du panache est *ergodique* : On a d'un côté une dispersion statistique qui mesure, en quelque sorte, l'incertitude sur la position d'une particule à chaque instant ; et de l'autre, un champ de concentration étalé sous l'effet de l'hétérogénéité du champ de vitesse réel. L'ergodicité appliquée à ce problème consiste à dire que l'étalement statistique du premier est égal à l'étalement spatial du second. En faire l'hypothèse impose des conditions sur le milieu, le type d'écoulement et la disposition des

points du panache initial. Par exemple, si l'hétérogénéité de perméabilité n'est pas trop forte et stationnaire, c'est-à-dire si ses lois statistiques sont les mêmes en tout point de l'espace ; si, de plus, l'écoulement est en moyenne uniforme ; et si, enfin, les particules sont lâchées le long d'une ligne suffisamment longue, alors le panache est ergodique [Tomkins et al. 1994 ; Zhang et Federico 1998]. On peut obtenir l'ergodicité également avec un point de lâcher, mais après une certaine distance minimale de parcours toutefois, lorsque le taux d'étalement statistique du panache, ou *dispersivité*, cesse de changer pour atteindre une valeur asymptotique. Nous avons voulu mettre à l'épreuve ces concepts, et notamment l'existence d'une dispersivité intrinsèque au milieu poreux, en investigant l'étalement de panaches de particules en écoulements non uniformes, par méthode stochastique. Ce travail est exposé en deuxième partie, chapitre 3. Or, la modélisation numérique requérant un maillage et donc des conditions aux limites, nous avons constaté en menant cette étude qu'elles avaient un impact visible et important sur l'écoulement et le transport. Impact qui devait être pris en compte dans l'interprétation des résultats. C'est pourquoi nous présentons d'abord, au chapitre 2, l'étude détaillée, empirique puis dans la mesure du possible, théorique, de l'influence de conditions aux limites déterministes sur les propriétés stochastiques de la charge hydraulique, de la vitesse de Darcy, et de la position d'une particule.

L'implémentation numérique des modèles physiques constitue un métier à part entière, et fait face à ses difficultés propres. La partie III y est consacrée. Notre outil de modélisation Cast3M dispose d'une bibliothèque de méthodes numériques et d'algorithmes qui sont le fruit du travail de plusieurs équipes pendant deux décennies. En particulier, l'opérateur de calcul de trajectoires, qui constitue une brique fondamentale des études stochastiques introduites ci-dessus, a été construit sur plusieurs années. Même si son utilisation dans la partie II se limite à suivre une ligne de courant, l'introduction d'une composante "marche aléatoire" présente de nombreux avantages. Les plus notables sont (i) la possibilité de prendre en compte une micro-dispersion correspondant à des hétérogénéités de sous-maille ou à de la diffusion moléculaire, et (ii) ouvre la porte à la modélisation du transport sous convection dominante, qui pose de grandes difficultés avec des méthodes eulériennes. On présente donc chapitre 4 un algorithme numérique, indépendant du type d'éléments finis mais illustré sur des Éléments Finis Mixtes Hybrides pour l'occasion. Il repose sur un parti-pris de localité de la résolution, et est mis à l'épreuve d'un cas-test de bistrature pour vérifier s'il y a accumulation de particules aux interfaces entre zones à fort contraste de diffusivité.

Enfin, au titre d'une deuxième illustration d'algorithme numérique, la prise en compte d'une géochimie simplifiée est décrite chapitre 5. Les phénomènes physiques pris en compte sont directement inspirés du stockage de déchets radioactifs, mais jouissent d'une grande généralité mathématique. En particulier, on prend en compte un terme de décroissance radioactive, ainsi que, et en y mettant un fort accent, de la précipitation d'une espèce dissoute en une phase solide fixe qui, réciproquement, est susceptible de se dissoudre. Plusieurs cinétiques d'échange entre les phases

précipitée et dissoute seront envisagées, comme une limite de solubilité à cinétique instantanée ou d'ordre un, et une dissolution imposée. Les équations couplées de conservation du soluté et du précipité sont donc non linéaires et on a recours pour les résoudre à la méthode de Picard. On comparera l'efficacité de différents algorithmes de résolution. Ce chapitre sera également l'occasion de rappeler un certain nombre de critères de précision et de stabilité des schémas numériques des différents termes des équations.

Chaque chapitre faisant l'objet d'une introduction et d'une conclusion détaillées, je ne suis pas rentré ici dans le détail intime des exposés pour éviter la redondance. Les chapitres sont résumés en en-tête. Ils retracent des travaux effectués sur les huit années de mon activité à la Direction de l'Énergie Nucléaire du Commissariat à l'Énergie Atomique, et sont autonomes pour l'essentiel. Ils se renvoient toutefois les uns aux autres en différentes occasions. On peut ainsi les lire séparément. Le lecteur trouvera parfois un préambule expliquant brièvement l'évolution ou les suites données à la recherche exposée. Lorsque les travaux ont été publiés, notamment sur la dispersivité en écoulement non uniforme, l'article est annexé au chapitre concerné.

Première partie

Transferts à physique complexe

Chapitre 1

Établissement d'un modèle thermo-hydraulique

Résumé

Parmi les différentes prises en charge envisagées pour assurer un devenir aux déchets radioactifs figure l'entreposage de longue durée, possiblement quelques siècles, dans l'hypothèse qu'un retraitement efficace voie ultérieurement le jour. La plupart des scénarios implique la présence d'une nappe phréatique dans le matériau de la couche géologique d'accueil. La contrainte principale d'un tel dispositif est la possibilité de reprendre les colis radioactifs, et par conséquent, la tenue à très long terme d'installations de génie civil soumises à de fortes contraintes thermiques pendant la phase de refroidissement. Les matériaux hôtes envisageables : calcaire, argile, granite, ... ont des cinétiques hydrauliques trop longues pour faire l'objet d'expériences *in situ* rapides. On a préféré conserver l'aspect générique du problème : une source chauffante dans un milieu saturé d'eau et soumis à un gradient "naturel", et le mettre en œuvre artificiellement dans du sable ; matériau plus facilement contrôlable, instrumentable, et surtout, plus perméable. C'est ainsi qu'est née la maquette MASCILIA.

Cette partie retrace le premier volet de la simulation de son fonctionnement, sous trois angles différents. On décrit le modèle physique théorique, la modélisation numérique et les résultats de calcul. A ce titre, on expose et on critique un modèle thermo-hydraulique – débordant largement du cadre de la maquette MASCILIA – tenant compte également d'une phase air. La réduction physique du problème aux phénomènes pertinents de la maquette, ainsi que son intégration numérique sont ensuite présentées. J'indique en particulier comment traiter la réduction du régime multiphasique en un régime monophasique. La dernière partie, enfin, rend compte de l'implémentation dans Cast3M de la majorité des phénomènes pertinents à travers des calculs correspondant à une situation nominale de fonctionnement de la maquette.

Les calculs 2D et 3D montrent que la modélisation rend correctement compte des phénomènes physiques attendus, comme l'apparition d'une "bulle" de vapeur autour de la source thermique, l'effet caloduc, les convections naturelle et forcée ; et donne des informations qualitatives vis-à-vis du dimensionnement, notamment en ce qui concerne le temps d'installation du régime permanent et les températures maximales observées. Les résultats quantitatifs cadrent cependant assez mal avec les résultats expérimentaux, pour des raisons qui touchent autant aux valeurs des paramètres utilisés qu'à l'imprécision du schéma numérique.

Introduction

Cette travail trouve sa source dans une demande de la Direction du Cycle du Combustible du CEA, qui a en charge l'étude du projet d'entreposage de déchets radioactifs. Le programme REPO (pour REfroidissement POlyphasique) vise en particulier à garantir que le refroidissement pendant quelques siècles de ces déchets thermiquement actifs se fasse dans de bonnes conditions, en attendant qu'une solution satisfaisante soit trouvée quant à leur valorisation ou leur destruction. Le mode d'entreposage dépend du scénario retenu. Il en existe plusieurs suivant la profondeur (en surface, en casemate ou en subsurface), le type de milieu géologique (argile, granite, calcaire, ...) – cette question est étroitement liée au choix du site –, le processus de refroidissement (ventilation ou convection libre), la présence d'écoulement souterrains, etc.

La tenue de l'entreposage en température nécessite que le milieu évacue suffisamment vite la chaleur générée par les déchets nucléaires. Dans l'hypothèse d'un entreposage en subsurface en milieu géologique (à flanc de colline par exemple), les transferts thermiques dépendent fortement de la présence et de l'écoulement de l'eau et des gaz (air et vapeur) au sein des pores. De même, les paramètres contrôlant l'écoulement dépendent aussi de la température. C'est la présentation de ce phénomène couplé, du point de vue de ses modélisations physique et numérique, et de son implémentation dans le code Cast3M que nous allons faire ici. Le couplage avec la mécanique du fait des variations de porosité et de l'endommagement du matériau géologique sous l'action des pressions n'est pas abordé ici. Il fait l'objet de modélisations Thermo-Hydro-Mécaniques spécifiques menées en parallèle, concernant notamment le comportement en réhydratation de bouchons d'argile scellant les galeries [*Maugis 2002*].

Afin de valider le code de calcul permettant de prévoir la tenue à long terme du colis et de son environnement (dans l'idée d'être capable de le récupérer très longtemps après son dépôt), la comparaison avec des expériences sur maquette peut apporter des éléments convaincants. Malheureusement, les temps de transfert dans les roches compactes sont très longs, car ces milieux sont de mauvais conducteurs hydrauliques, ce qui rend les expérimentations grandeur nature très coûteuses. De plus ces milieux sont également hétérogènes et demandent de très importants efforts de caractérisation. Il a donc été choisi, dans un premier temps, de construire une maquette avec du sable, plus facile à mettre en œuvre et à caractériser, fortement perméable, et où la mécanique intervient peu aux échelles considérées. C'est le principe de la maquette MASCILIA [*Castelier et al 1999* ; *Castelier et al 2002*], que nous exposons en troisième partie avec les résultats des premiers calculs correspondant au fonctionnement nominal. L'objet de cette maquette est de stimuler thermiquement (à l'aide d'un mandrin chauffant) du sable initialement saturé, tout comme un conteneur de déchets le ferait sur le béton et la roche d'accueil environnants, éventuellement parcouru par un flux d'eau, et

d'observer la formation d'une bulle de vapeur générée par la montée en température. Le code ainsi qualifié sur l'expérience pourrait être utilisé dans des cas plus réalistes.

L'étape présentée est celle de la démonstration de la capacité à traiter physiquement et numériquement le problème. Au moment où ce travail a été réalisé, la mise en œuvre concrète de modèles thermo-hydrauliques commençait. Aux États-Unis, le laboratoire Sandia avait déjà une certaine avance [Martinez et al.], mais le travail, en France, en était essentiellement à la définition de modèles de description thermodynamique de la capillarité [Dangla et Coussy 1996], et plus tard [Coussy 2004], et au lancement de projets thermo-hydro-mécaniques sur les argiles [UPC 1997 ; Volckaert et al. 1996a] sur lesquels nous nous sommes appuyés.

En principe, trois autres étapes doivent faire suite : le dimensionnement de la maquette, en obtenant par des études paramétriques, des valeurs de granulométrie du sable, de puissance thermique à exercer, d'intensité du flux d'eau entrant, ... optimales du point de vue de la faisabilité, du temps d'expérimentation, de la sollicitation physique des dispositifs, du coût, etc. ; puis la comparaison quantitative aux résultats expérimentaux ; et enfin la critique et l'amélioration du modèle, et le calage des paramètres physiques. Pour des raisons d'orientation de la recherche, nous n'avons pas dépassé la première étape. Toutefois, on présente la comparaison des résultats préliminaires de modélisation avec des observations expérimentales pour un régime thermique et hydraulique donné.

Notation

Les indices w , v , a , aq , l , g , s repèrent respectivement l'eau liquide, l'eau vapeur, l'air sec, l'air dissout, la phase liquide, la phase gazeuse et le solide. i est l'indice générique d'un constituant, j celui d'une phase. *s.d.* signifie "sans dimension". L'écriture mX stipule que la grandeur X est définie par unité de masse, et vX (resp. vX_j) par unité de volume de milieu poreux (resp. de la phase j), alors que X ou nX signifie la grandeur par mole, ce qui est la convention par défaut (on a donc, si M est la masse molaire, et ν le volume molaire, $^nX = M ^mX = \nu ^vX$). Enfin, \bar{x} désigne la valeur moyenne de la grandeur physique x sur un volume de milieu, en intégrant la contribution de chaque phase (par exemple $\bar{\rho}$, \bar{c}_p , $\bar{\lambda}$...).

On note :

Grandeurs physiques

- g l'accélération de la pesanteur (m/s^2),
- M_i la masse molaire du constituant i (kg/mol),
- \bar{M}_g la masse molaire moyenne du gaz (kg/mol),
- R la constante des gaz parfaits ($8,314 kg/mol K s^2$).
- t le temps (s),

- x , y et z les coordonnées (m),
- ω la porosité (*s.d.*),
- ${}^m\rho_i$, ou ρ_i , la masse volumique du constituant i dans sa phase (kg/m^3),
- ${}^n\rho_i$ la densité molaire du constituant i dans sa phase (mol/m^3),

Grandeurs hydrauliques

- C la concentration (mol/l)
- d_{0j} le coefficient de diffusion moléculaire dans la phase j pure et infinie (m^2/s),
- D_j le coefficient de diffusion effectif en milieu poreux (m^2/s),
- \mathcal{H} l'humidité relative (*s.d.*),
- h_j la charge hydraulique de la phase j (m),
- \vec{j}_i^j la densité de flux diffusif massique du constituant i dans la phase j (kg/m^2s),
- k la perméabilité intrinsèque (m^2),
- k_j^r la perméabilité relative de la phase j (*s.d.*),
- K_j la conductivité hydraulique de la phase j (m/s),
- P_j la pression de la phase j (Pa),
- p_j la pression de la phase j (idem, mais en m),
- P_c la pression capillaire (Pa),
- P_{osm} la pression osmotique (Pa),
- vQ_i les masses de constituant i apportées au système par unité de volume de milieu poreux et par unité de temps (kg/m^3s),
- ${}^vQ'_i$ idem, mais en ayant ôté la contribution positive du changement de phase (kg/m^3s).
- S_j la saturation (*s.d.*),
- \vec{U}_j la vitesse de Darcy (m/s),
- μ la viscosité dynamique (kg/ms),
- ν_j le volume molaire de la phase j (m^3/mol),
- ν_{tm} le coefficient de transfert de masse (*s.d.*),
- ω_j^i la fraction molaire du constituant i dans la phase j ,
- ${}^m\omega_j^i$ la fraction massique du constituant i dans la phase j ,
- ψ la succion (m),
- τ_j la tortuosité (*s.d.*),
- θ_j la teneur en phase j (*s.d.*); on note $\theta = \theta_l$ la teneur en liquide,

Grandeurs thermodynamiques

- k_H le coefficient de Henry (*s.d.*).
- P la pression (Pa),
- T la température (K),
- T_0 température de l'état standard, $298K$,
- V le volume (m^3),
- \mathfrak{G} , \mathfrak{g} l'enthalpie libre ou énergie de Gibbs (J), resp. molaire (J/mol),
- \mathfrak{H} , \mathfrak{h} l'enthalpie (J), resp. molaire (J/mol),
- \mathfrak{Q} , \mathfrak{q} la chaleur (J), resp. molaire (J/mol),

- \mathfrak{U} , u l'énergie interne (J), resp. molaire (J/mol),
- \mathfrak{S} , s l'entropie (J/K), resp. molaire ($J/molK$),
- \mathfrak{W} le travail des forces mécaniques (J), somme des deux suivantes :
- \mathfrak{W}_m le travail des forces mécaniques (J),
- $\mathfrak{W}_{non\ exp.}$ le travail des forces sans variation de volume (J),
- μ_j^i le potentiel chimique du constituant i en phase j (J/mol),
- ν_j le volume molaire d'une phase, ou ν_i d'un constituant pur dans sa phase (m^3/mol),
- ϕ_j le potentiel matriciel (Pa),
- φ_j le travail des forces de surface appliquées par le solide sur la phase j (J/mol),

Grandeurs thermiques

- c_i la capacité calorifique massique à pression constante (J/kgK),
- L_d l'enthalpie molaire de dissolution de l'air dans l'eau (J/kg),
- L_v la chaleur latente molaire de vaporisation (J/kg),
- j_Q la densité de flux thermique (J/m^2s),
- vQ_T le terme source thermique apporté au système par unité de volume de milieu poreux et par unité de temps (J/m^3s), auquel contribuent les deux termes suivants :
- ${}^vQ_\Omega$ la chaleur volumique apportée au système, mais en ayant ôté la contribution positive des chaleurs latentes des masses d'air et de vapeur introduites dans le système (J/m^3s),
- ${}^vQ_{\mathfrak{W}_{non\ exp.}}$ le travail volumique des forces non expansives reçu par le système (J/m^3s).
- λ la conductivité thermique (J/msK),

1.1 Présentation du modèle thermo-hydraulique

Nous décrivons ici le modèle physique lié au transport de fluide et de chaleur en milieu poreux non saturé avec ou sans air sec, et en l'absence de déformation du milieu. Ce modèle a été présenté à de nombreuses reprises et est classique [Bear et Verruijt 1992] [De Marsily 1986], à quelques termes près. Il est utilisé par de nombreuses équipes dont celle de l'Université Polytechnique de Catalogne [Volckaert et al. 1996a] et la nôtre, au CEA, pour l'étude du comportement thermo-hydro-mécanique des barrières ouvragées d'argile. Pollock (1986) présente l'application de ce modèle thermo-hydraulique couplé à un site de stockage éventuel dans du tuff volcanique. Son modèle constitue le point de départ de notre travail, et a été en partie étendu.

Le modèle prend en compte :

- deux phases, liquide et gazeuse,
- deux constituants : l'eau (liquide et vapeur) et l'air sec,
- la vaporisation et la condensation de l'eau,

- l'air dissout dans l'eau,
- la convection de chaque phase,
- la capillarité sous la forme de loi de saturation et de conductivités relatives,
- la diffusion en phases gazeuse et aqueuse,
- la conduction thermique,
- le transport d'énergie dû aux variations de pression.

et ne prend pas en compte :

- la dilatation thermique de l'eau,
- la compressibilité de l'eau,
- la déformation de la matrice hôte,
- le comportement non parfait de la vapeur,
- le comportement hystérétique des lois capillaires,
- les dispersivités hydraulique et thermique,
- les dissipations visqueuses dans le modèle thermique,
- toute variation du coefficient de Henry (avec la température, l'espèce chimique, etc.).

1.1.1 Deux constituants eau - air sec

On définit d'abord les phénomènes physiques avant d'écrire les lois de conservation. Cet exposé sert de base théorique à l'approche générale de l'écoulement en milieu diphasique susceptible d'être dégénéré en monophasique. Il dépasse largement le cadre de la maquette MASCILIA.

1.1.1.1 Variance du système

Le système comporte 2 phases et 2 constituants, soit 6 degrés de liberté : deux fractions massiques (une pour chaque phase ; la somme des fractions massiques des constituants de chaque phase vaut 1), la répartition volumique de chaque phase, la température et les pressions de chaque phase (puisqu'elles ne sont pas égales). Pour résoudre le système à l'équilibre thermodynamique, on dispose de deux équilibres interphases : l'un pour l'eau (la loi de Kelvin assortie de la loi de pression de vapeur saturante), l'autre pour l'air (la loi de Henry) ; de la loi capillaire ; et des trois équations de conservation (masse d'eau, masse d'air, chaleur). Le système est ainsi correctement posé. A partir des lois d'état, on peut remonter aux masses volumiques des constituants.

L'équilibre thermodynamique est supposé local seulement. Pour comprendre son évolution sous l'effet de perturbations, il faut être capable d'exprimer chaque phénomène transitoire (diffusion, convection, etc.) en fonction des six variables ci-dessus. Les lois phénoménologiques (loi de Kelvin, loi de Henry et loi capillaire) permettent de réduire ce nombre à trois, autant que d'équations de bilan. Il suffira donc de trois variables principales pour définir entièrement le système.

1.1.1.2 Écoulement des phases liquide et gazeuse

Nitao et al. (1996) suggèrent d'utiliser comme potentiel moteur de l'écoulement d'une phase, tel que cet écoulement est décrit par la loi de Darcy éq. (1.1), non pas la charge hydraulique, mais plus généralement, l'énergie de Gibbs \mathfrak{G} (ou enthalpie libre) de la phase. Cette énergie tient compte, en plus de la pression de la phase et de la gravité, de la contribution non-isotherme, des forces osmotiques et de l'adsorption de l'eau en surface du solide. Nous allons détailler chacun de ces effets, et voir plus loin ce que cela veut dire.

Définitions préliminaires

On définit la réduction des pressions en mètres d'eau, nulles à pression atmosphérique et négatives en-dessous (exceptée la pression capillaire qui n'est nulle qu'à égalité entre les pressions des deux phases) :

$$\triangleright p_l = \frac{P_l - P_{atm}}{\rho_w g}$$

$$\triangleright p_g = \frac{P_g - P_{atm}}{\rho_w g}$$

$$\triangleright \psi = p_l - p_g = -\frac{P_c}{\rho_w g}$$

ψ est la rétention (en mètres d'eau), négative en non saturé. Elle est confondue avec la succion dans certains cas, ainsi que nous allons le voir au §1.1.1.2.

On utilisera également les saturations S_l et S_g , qui sont les teneurs en liquide θ_l et en gaz θ_g divisées par la porosité ω , donc comprises entre 0 et 1.

Les perméabilités

En principe, le déplacement d'une phase doit agir sur le déplacement de l'autre par friction ; c'est-à-dire que le flux d'eau, par exemple, dépend et du gradient de potentiel d'eau, et du gradient de potentiel de gaz, via des perméabilités K_{ll} et K_{lg} . Cependant, on va négliger ici ces effets d'entraînement inter-phase caractérisés par les perméabilités "extra-diagonales" K_{lg} et K_{gl} , et noter $K_l = K_{ll}$ et $K_g = K_{gg}$. Cette hypothèse est classique pour un mélange diphasique d'air et d'eau, mais n'est pas forcément justifiée quand les deux phases sont à contre-courant.

Les lois de Darcy généralisées permettent d'écrire les flux convectifs de liquide et de vapeur [De Marsily 1986] :

$$\vec{U}_l = -\frac{K_l}{\rho_w g} \vec{\nabla} \phi_l \quad (1.1a)$$

$$\vec{U}_g = -\frac{K_g}{\rho_w g} \vec{\nabla} \phi_g \quad (1.1b)$$

ϕ_l et ϕ_g étant les potentiels de la phase liquide et de la phase gazeuse respectivement. Ce sont des énergies volumiques (Pa) définies plus loin.

K_l et K_g sont les conductivités hydrauliques du liquide et du gaz respectivement. Elles dépendent de la saturation et de la température suivant les lois ci-après :

$$\begin{aligned} K_l(\theta, T) &= \frac{\rho_w g k k_l^r(\theta)}{\mu_w(T)} \\ K_g(\theta, T) &= \frac{\rho_w g k k_g^r(\theta)}{\mu_g(T)} \end{aligned} \quad (1.2)$$

où k est la perméabilité intrinsèque du milieu poreux et est indépendante du fluide y circulant. Par hypothèse, ρ_w et k sont constants.

Les lois de perméabilités relatives $k_j^r(\theta)$ correspondent à un milieu donné et dépendent du niveau de saturation via la teneur en eau θ . Elles peuvent éventuellement dépendre de la température, mais la source principale de variation des K_j avec T est la diminution des viscosités dynamiques avec la température.

L'enthalpie libre d'une phase

Le premier principe de la thermodynamique donne pour un système fermé $d\mathfrak{U} = \delta\mathfrak{Q} + \delta\mathfrak{W}$, où \mathfrak{W} est le travail des forces exercées sur le système, \mathfrak{Q} la chaleur qu'il a reçue, et \mathfrak{U} son énergie interne. \mathfrak{W} englobe l'ensemble des travaux des forces microscopiques et macroscopiques, à longue portée ou à courte portée, comme : le travail φ reçu par le système des forces surfaciques des interactions fluide-roche (φ est négatif lorsque ces forces sont attractives); le travail des forces osmotiques; de la gravité; ainsi que le travail nécessaire pour engendrer des variations de volume $\delta\mathfrak{W}_m = -PdV$. On peut y adjoindre aussi le travail de forces électriques, et, à l'envi, de tout autre processus dont l'explicitation de la participation au bilan énergétique présenterait un intérêt. On rassemble sous l'écriture $\delta\mathfrak{W}_{non\ exp.} = \delta\mathfrak{W} - \delta\mathfrak{W}_m$ les travaux de toutes les forces non expansives.

De la définition de l'enthalpie $\mathfrak{H} = \mathfrak{U} + PV$, il ressort par différentiation que

$$d\mathfrak{H} = \delta\mathfrak{Q} + VdP + \delta\mathfrak{W}_{non\ exp.} \quad (1.3)$$

Le second principe nous apprend que $d\mathfrak{S} = d\mathfrak{S}_{rev.} + d\mathfrak{S}_{irr.}$, où $\delta\mathfrak{Q} = Td\mathfrak{S}_{rev.}$, et $d\mathfrak{S}_{irr.} \geq 0$. En reprenant l'expression (1.3) pour définir l'enthalpie libre, aussi appelée énergie de Gibbs, $\mathfrak{G} = \mathfrak{H} - T\mathfrak{S}$, on déduit que

$$d\mathfrak{G} = VdP - \mathfrak{S}dT - Td\mathfrak{S}_{irr.} + \delta\mathfrak{W}_{non\ exp.} \quad (1.4)$$

On ne retiendra désormais, parmi les forces non expansives, que la sorption et la gravité. Concernant la sorption, il convient de faire la part dans ses variations entre celles qui sont indépendantes du chemin parcouru, c'est-à-dire réversibles et qui dérivent par conséquent d'un potentiel $d\varphi_{rev.}$; et celles qui sont irréversibles $d\varphi_{irr.}$, qui incarnent l'hystérésis d'adsorption/désorption. Alors, en prenant compte des

transferts de matière pour un système ouvert, l'expression de l'enthalpie libre de la phase j s'écrit :

$$d\mathbf{g}_j = \nu_j dP_j - \mathbf{s}_j dT + \sum_i \mu_j^i d\omega_j^i + d\varphi_{j,rev.} + \bar{M}_j g dz + \delta\varphi_{j,irr.} - T d\mathbf{s}_{j,irr.} \quad (1.5)$$

où ν_j est le volume molaire de la phase j , P_j sa pression, \mathbf{s}_j son entropie molaire, \bar{M}_j sa masse molaire moyenne, μ_j^i le potentiel chimique du constituant i dans la phase j , ω_j^i sa fraction molaire, l'axe des z étant orienté vers le haut. Dans l'expression (1.5), on trouve dans l'ordre les contributions des forces mécaniques, de l'enthalpie libre thermique, de l'adjonction de différents constituants, des forces de sorption, des forces de gravité, et des fractions irréversibles du travail de sorption et de l'entropie, respectivement.

Une autre écriture [de Groot et Mazur 1963] consiste à ne faire figurer que les trois premiers termes dans l'expression précédente, et à rejeter les autres dans une variation de l'énergie cinétique du système annulant, *via* le principe fondamental de la dynamique, $\delta\mathfrak{W}_{non exp.}$ mais le réaffectant à la variation d'entropie.

Le potentiel chimique d'un constituant

L'énergie de Gibbs molaire \mathbf{g}_j d'une phase j s'écrit comme la somme des potentiels chimiques μ_j^i de ses constituants, pondérés par leurs fractions molaires ω_j^i :

$$\mathbf{g}_j = \sum_i \mu_j^i \omega_j^i \quad (1.6)$$

Le potentiel chimique μ_j^i est ainsi l'énergie de Gibbs molaire partielle du constituant i dans la phase j . Les deux sont confondus pour un fluide pur. Dans le cas d'un mélange réactif, μ_j^i dépend non seulement de ω_j^i , mais aussi des $\omega_j^{k \neq i}$.

On constate sur l'expression (1.5) que

$$\mu_j^i = \left(\frac{\partial \mathbf{g}_j}{\partial \omega_j^i} \right)_{P,T,z} \quad (1.7)$$

où $\omega_j^i = n_j^i/n_j$ est le nombre de moles du constituant i en phase j par mole de phase j . On déduit de (1.6) et (1.7), comme \mathbf{g}_j est une grandeur extensive, que

$$\sum_i \omega_j^i d\mu_j^i = \nu_j dP_j - \mathbf{s}_j dT + d\varphi_{j,rev.} + \bar{M}_j g dz \quad (1.8)$$

qui permet d'identifier, moyennant l'hypothèse de mélange parfait $P_j = \sum_i P_j^i$, et en remarquant que, puisque $\nu_j = \nu_j^i$ pour chaque constituant i , on a aussi $\nu_j = \sum_i \omega_j^i \nu_j^i$:

$$d\mu_j^i = \nu_j dP_j^i - \mathbf{s}_j^i dT + d\varphi_{j,rev.}^i + M_i g dz$$

(1.9)

où P_j^i est la pression partielle du constituant i en phase j ; \mathfrak{s}_j^i son entropie molaire (par mole du constituant) ; $\varphi_{j,rev}^i$ le potentiel (donc réversible) de surface apporté par le solide sur lui, homogène à une pression ; et M_i sa masse molaire. Cette expression est formellement équivalente à celle de l'enthalpie libre (1.5), sauf qu'on a utilisé les grandeurs partielles.

Dans le cas particulier d'une eau pure isotherme non sorptive, avec des transferts adiabatiques et réversibles, on obtient de (1.5) une relation simple entre enthalpie libre \mathfrak{g}_w et charge piézostatique $h_l = P_l/\rho_w g + z$:

$$h_l = \frac{1}{M_w g} \mathfrak{g}_w + \text{cste} \quad (1.10)$$

Dans ce contexte simplifié, le potentiel hydraulique de l'eau $\phi_l = \rho_w g h_l$ intervenant dans la loi de Darcy (1.1), n'est autre que son enthalpie libre \mathfrak{g}_w au diviseur ν_w près.

Flux : quelles relations pour quels gradients ?

Peut-on connaître, à partir des potentiels chimiques, les flux de matière, d'énergie et autres, que subit un système ? Il serait hâtif de penser que les gradients d'enthalpie libre contrôlent les écoulements de la phase eau. En effet, chacune des forces subies par l'eau procède de processus différents. Si \mathfrak{U} , ainsi que les autres variables d'état \mathfrak{H} , \mathfrak{G} , \mathfrak{F} , \mathfrak{S} , etc. décrivent l'état d'équilibre d'une phase, elles ne permettent pas pour autant de décrire les variations du système hors équilibre. Par équilibre, on entend l'équilibre vrai du système pour lequel "les actions extérieures sont des fonctions univoques des variables d'état". Un des corollaires de cette définition est l'état statique, où les flux sont nuls. Un système peut ainsi être inerte, mais hors équilibre en raison de forces de frottement ou d'hystérésis.

Sous les hypothèses d'équilibre local et de petites variations autour de l'équilibre, chaque flux engendré suit une relation linéaire, au premier ordre, avec la *force thermodynamique* qui l'impulse. Cette dernière, également appelée *affinité généralisée*, ou *gradient généralisé*, est le terme par lequel doit être multiplié le flux pour obtenir un accroissement de l'entropie irréversible. En effet, tout système évolue spontanément dans le sens qui maximise son entropie. Il va donc suivre la "plus grande pente" entropique. L'entropie devant toujours augmenter, elle est définie positive, et est donc une forme quadratique (en première approximation). Ceci a pour conséquence les relations linéaires entre flux et gradients généralisés.

Ainsi, si l'on s'intéresse, par exemple, aux flux de chaleur \vec{j}_Q , d'eau \vec{j}_w , de charge électrique \vec{j}_q et de soluté \vec{j}_C , on peut utiliser une matrice 4×4 d'Onsager [Bruhat 1968], qui va les exprimer à partir des forces thermodynamiques $\vec{\mathcal{F}}_T$, $\vec{\mathcal{F}}_w$, $\vec{\mathcal{F}}_q$ et $\vec{\mathcal{F}}_C$ respectivement (Fig. 1.1).

Dans cette matrice, chaque nom correspond à un phénomène physique dont on a mis en rouge le nom du découvreur. On peut aussi référencer les termes de cette

$$\begin{array}{c} \vec{j}_Q \\ \vec{j}_w \\ \vec{j}_q \\ \vec{j}_C \end{array} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} \text{Fourier} & \text{Filtration} & \text{Thomson} & \text{Dufour} \\ & \text{thermique} & \text{-Peltier} & \\ \text{Knudsen} & \boxed{\text{Darcy}} & \text{Casagrande} & \text{Osmose chimique} \\ \text{(osmose thermique)} & & \text{(Electro-osmose)} & \\ \text{Seebeck} & \text{C. d'écoulement} & \text{Ohm} & \text{C. de sédimentation} \\ & & & \text{Oxydo-réduction} \\ \text{Soret} & \text{Ultrafiltration} & \text{Reuss} & \text{Fick} \\ & & \text{Électrophorèse} & \end{array} \right] \times \begin{array}{c} \vec{\mathcal{F}}_T \\ \vec{\mathcal{F}}_w \\ \vec{\mathcal{F}}_q \\ \vec{\mathcal{F}}_C \end{array} \right. \quad (1.11)
\end{array}$$

FIG. 1.1: Matrice d'Onsager déclinées pour quatre classes de processus physiques. En rouge, le nom du découvreur donné à l'effet en question. Le mot 'Courant' a été abrégé par 'C.'.

matrice avec des indices ij . Chaque gradient de variable d'état contribue au flux considéré par l'entremise d'un coefficient multiplicatif qui lui est propre. Une des propriétés les plus remarquables de cette matrice est sa symétrie [*Onsager 1931* ; *Prigogine 1947*]. Par exemple $L_{23} = L_{32}$. C'est-à-dire que le rapport de proportion entre la force thermodynamique électrique et le flux d'eau induit par électro-osmose est le même qu'entre la force thermodynamique de déplacement de matière et le courant électrique qu'il induit. Pour caractériser un phénomène, il suffit donc de mesurer son symétrique. Par contre, on a *a priori* $L_{22} \neq L_{23}$. Cela signifie qu'on ne peut pas déduire la perméabilité hydraulique de mesures d'écoulement causé par une tension électrique, comme il est pourtant tentant de le faire dans les argiles, car les processus physiques sous-jacents sont différents.

La force généralisée engendrant un flux de chaleur est $\vec{\mathcal{F}}_T = \vec{\nabla}(1/T)$. Celle engendrant un flux diffusif molaire (type Darcy ou Fick) d'un constituant i est $\vec{\mathcal{F}}_i = -\vec{\nabla}(\mu_i/T)$ où μ_i est le potentiel chimique molaire limité aux seules contributions de pression et température (les deux premiers termes du membre de droite de (1.9), conformément à l'écriture de l'énergie libre de de Groot et Mazur 1963), auquel on peut éventuellement adjoindre, suivant le choix d'écriture de la matrice, la contribution des forces extérieures \vec{F}_i^{ext}/T exercée sur le constituant. Typiquement, c'est là qu'intervient la gravité $\rho_i^m \vec{g}/T$. Remarquons l'égalité formelle de traitement du solvant w et du soluté C . On réserve l'écriture des forces électrostatiques au terme $\vec{\mathcal{F}}_q = q\vec{\mathcal{E}}/T$, où $\vec{\mathcal{E}}$ est le champ électrique.

Pour revenir à l'écoulement d'eau, puisque les termes figurant sur une même ligne

de la matrice d'Onsager sont différents, il ressort également qu'on ne peut recourir à une force thermodynamique unique. En effet, dans le contexte de ce paragraphe,

$$\vec{j}_w = -L_{21}\vec{\mathcal{F}}_T - L_{22}\vec{\mathcal{F}}_w - L_{23}\vec{\mathcal{F}}_q - L_{24}\vec{\mathcal{F}}_C \quad (1.12)$$

De plus, les forces thermodynamiques ne relèvent pas nécessairement d'un potentiel. Prenons ne serait-ce que le deuxième terme de l'expression (1.12). En supposant que les forces extérieures dérivent d'un potentiel \mathcal{U} (comme $\rho_w^m g z$), la force thermodynamique associée à la diffusion d'eau s'écrit aussi :

$$\vec{\mathcal{F}}_w = -\vec{\nabla} \frac{\mathcal{U} + \mu_w}{T} - \frac{\mathcal{U}}{T^2} \quad (1.13)$$

On voit que les deux potentiels se combinent en se sommant. Toutefois, travailler avec un potentiel total $\mathcal{U} + \mu_w$, revient à négliger le reliquat, certes potentiellement faible, $-\mathcal{U}/T^2$. On perçoit là la différence d'action des forces matérielles, directe, à celle des variations d'état thermodynamique, qui interviennent en étant pondérées par la température.

Encore faut-il déterminer les coefficients L_{ij} de la matrice d'Onsager. En cela, les concepts sur lesquels le présent paragraphe est rapidement revenu constituent plus un cadre de compréhension des processus qu'une quantification concrète de leurs amplitudes. Dans la pratique, le recours à des lois phénoménologiques s'impose dans bien des cas. A tout le moins, la thermodynamique permet de cadrer et d'aider à interpréter ce que l'on trouve expérimentalement.

Pour prendre en compte la sorption, il convient de considérer un constituant supplémentaire, l'eau liée, et une réaction chimique faisant passer de l'eau libre à l'eau liée. La contribution au flux d'eau libre de la sorption intervient par l'intermédiaire d'un "flux" réactif, qui n'est autre que la dérivée temporelle du coefficient d'avancement de la réaction, et d'une force thermodynamique qui est égale à l'affinité chimique de l'eau libre par rapport à l'eau liée, divisée par la température.

Correction à la loi de Laplace - La pression différentielle de sorption

L'existence de sorption de l'eau à l'échelle microscopique modifie la signification de la pression capillaire macroscopique. Nous allons en effet voir dans ce paragraphe qu'elle ne doit pas être interprétée simplement comme la différence des pressions de liquide et de gaz, mais qu'elle dépend également de la variabilité spatiale des forces de sorption ainsi que de la géométrie du milieu poreux.

La loi de Laplace exprime le saut de pression à l'interface entre deux fluides en fonction du rayon de courbure de l'interface. Elle s'écrit :

$$P_g - P_l = \frac{2\gamma_{lg}}{\mathcal{R}_{lg}} \quad (1.14)$$

où γ_{lg} est la tension superficielle de l'interface liquide-gaz, et \mathcal{R}_{lg} son rayon de courbure moyen. Cette relation est valable à l'échelle microscopique au voisinage de l'interface. P_g et P_l ne vérifient pas cette loi loin de l'interface à cause de la proximité du solide. Que vaut alors la différence des pressions macroscopiques entre les deux phases après passage à l'échelle d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de milieu poreux, et compte-tenu du potentiel de surface ?

En s'appuyant sur l'homogénéité du potentiel chimique de chaque constituant dans toutes les phases à l'équilibre thermodynamique, Nitao et al. (1996) obtiennent une équation de Laplace modifiée par les potentiels de sorption pour une phase eau pure, incompressible, isotherme dans le VER, et en tablant sur une faible dépendance du potentiel de surface avec la pression. Un premier résultat important est qu'en intégrant la relation (1.9), on obtient une expression simplifiée du potentiel chimique molaire de l'eau pour des points ayant à peu près la même cote (ce qui est le cas à l'échelle microscopique) :

$$\mu_l^w \approx \nu_w P_w + \varphi_w = \text{constante} \quad (1.15)$$

Dans la phase liquide, donc, si les interactions fluide-solide sont attractives, φ_w est négatif et la pression augmente à l'approche de la surface du solide. Ces variations de pression sont cependant à courte portée, si bien qu'à saturation élevée et si les pores sont relativement grands, la pression de liquide est globalement (c'est-à-dire d'un point de vue macroscopique) celle observée à l'interface avec le gaz. En revanche, lorsque la saturation est faible et que l'eau se trouve majoritairement sous forme de film, ou lorsque, comme dans l'argile, les pores sont si petits qu'on est toujours à portée d'une surface solide, le potentiel de surface doit être pris en compte dans le processus de moyenne donnant la pression macroscopique.

Nitao et al. (*op. cit.*) montrent ainsi qu'à l'échelle macroscopique :

$$\widetilde{P}_g^g - \widetilde{P}_w^l = \left(\frac{2\gamma_{lg}}{\mathcal{R}_{lg}} \right)^{lg} + \frac{\rho_w}{M_w} (\widetilde{\varphi}_w^{lg} - \widetilde{\varphi}_w^l) \quad (1.16)$$

où $\widetilde{\varphi}_w^l$ est le potentiel de sorption moyen de l'eau observé dans l'ensemble de la phase liquide, et $\widetilde{\varphi}_w^{lg}$ est le potentiel de sorption moyen de l'eau observé à l'interface avec le gaz. La pression de gaz a été supposée homogène à l'échelle du VER. En particulier, il n'y a pas d'adsorption de gaz en surface du solide.

Le saut de pression à l'interface est donc la somme de deux termes. L'un prend en compte l'effet combiné de la courbure et de la tension superficielle de l'interface liquide-gaz, l'autre résulte du potentiel de surface liquide-solide. On appelle ce saut de pression $\widetilde{P}_g^g - \widetilde{P}_w^l$, la *rétenion* r_f et le premier terme du membre de droite, la *pression capillaire* P_c , positive lorsque le liquide est mouillant. Le second terme ne porte pas spécialement de nom, mais on pourrait parler de *pression différentielle de sorption* P_s , négative lorsque le liquide est attiré par la paroi du solide :

$$r_f = P_g - P_l = P_c + P_s \quad (1.17)$$

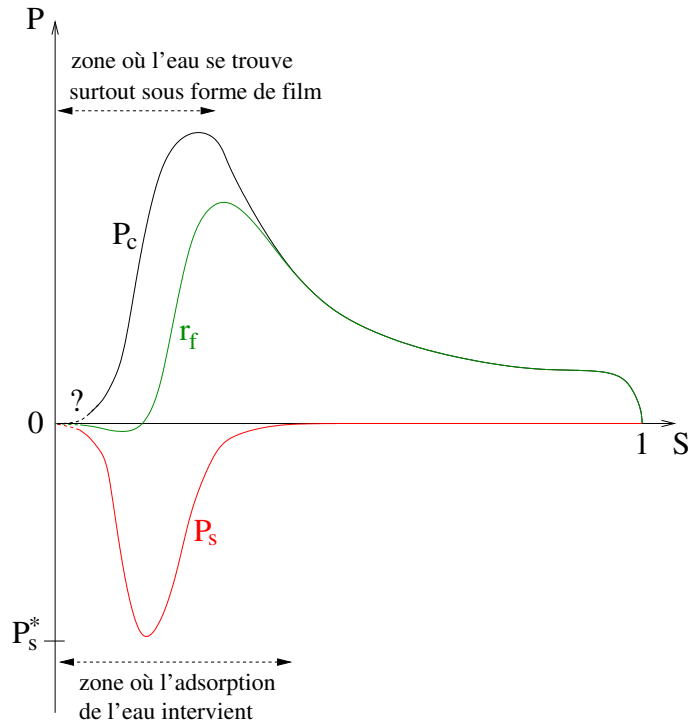


FIG. 1.2: Exemple de variation de la pression différentielle de sorption P_s , de la pression capillaire P_c et de la rétention r_f en fonction de la saturation en eau S . Les échelles ne sont pas représentatives.

On conçoit aisément que la pression différentielle de sorption s'annule aux hautes saturations, si les pores ne sont pas trop fins. Dans de l'argile, cependant, il est probable que même lorsque les espaces inter-feuillets sont saturés, l'eau reste soumise à d'importantes liaisons avec le solide. Ce doit cependant être un cas extrême. Ainsi, dans le sable, la pression différentielle de sorption est certainement faible à toute saturation. À mesure que la saturation décroît, l'influence du potentiel de surface commence à se faire sentir dans la masse d'eau, alors que l'interface liquide-air reste relativement loin du solide : $\widetilde{\varphi}_w^l$ augmente plus vite en valeur absolue que $\widetilde{\varphi}_w^{lg}$, donc la pression différentielle de sorption, initialement faiblement négative, décroît. Enfin, aux saturations très faibles, l'eau se présente presque exclusivement sous la forme de films adsorbés en surface des grains. Lorsque ces films deviennent extrêmement fins, les deux potentiels moyens sont très proches, ce qui fait que le potentiel de sorption tend vers une valeur négative très faible, possiblement nulle, lorsque la saturation tend vers zéro. Toutefois, soumise à des liaisons au solide aussi fortes, l'eau n'est probablement plus sous forme fluide. La figure 1.2 montre une forme possible de l'évolution de la pression différentielle de sorption avec la saturation.

En ce qui concerne la pression capillaire, son évolution loin de la désaturation

totale est bien connue, et plusieurs modèles existent. Dans tous les cas, elle est nulle en milieu saturé d'eau, et augmente à mesure que la saturation décroît et que les ménisques eau-air se forment. Quand la saturation diminue, les ménisques sont plus prononcés, parce que l'eau se retronche petit à petit dans les pores plus fins et aux joints de grain, et la pression capillaire croît. Si la saturation décroît encore, la proportion d'eau sous forme de film n'est plus négligeable devant l'eau pendulaire et le rayon de courbure moyen de l'interface liquide-gaz est majoritairement donné par celui des films d'eau adsorbés à la surface du solide. A l'échelle microscopique, cette courbure est proche de zéro si les films sont localement plans. Il en résulte que la pression capillaire macroscopique tend vers zéro (ou une valeur faiblement positive) lorsque la saturation tend vers zéro pour une topologie de grains plane à l'échelle microscopique. La prise en compte de cet effet nécessite d'adapter les courbes capillaires données par la littérature.

Entre autres conséquences, la rétention tend vers une valeur pratiquement nulle lorsque le milieu se sature en gaz. Ce résultat est intéressant d'un point de vue numérique et pourrait permettre de traiter de façon continue le passage de l'état diphasique à un état purement gazeux.

Dans ce contexte, on ne peut pas définir de saturation résiduelle S_r intrinsèque, car son observation dépend du processus expérimental. Ce peut être la saturation qui subsiste dans un milieu poreux lorsque l'on pompe indéfiniment son eau. Mais on aura un résultat différent par centrifugation ou en chauffant l'échantillon, ou encore en le ventilant avec de l'air sec et chaud. Si l'on souhaite modéliser un milieu totalement désaturé, cette approche le permet théoriquement.

Dans la suite de l'exposé, toutes les grandeurs qui seront utilisées sont des grandeurs macroscopiques homogénéisées sur leur phase dans un Volume Élémentaire Représentatif, si bien que nous abandonnons la notation $\tilde{()^j}$ correspondant à ce procédé.

Influence de la pression osmotique

Le potentiel chimique de l'eau liquide est affecté par la présence de solutés, que ce soit de l'air aqueux ou n'importe quel autre traceur. Landau et Lifshitz (1959) proposent une estimation statistique directe valable pour les solutions idéales [*Landau et Lifshitz 1959*, p267]. Le potentiel chimique de l'eau est modifié d'un "potentiel osmotique" $\varphi_{osm}^w = -RT\omega_l^a$ (où ω_l^a désigne la fraction molaire de l'espèce dissoute, l'air dans le cas présent), et le potentiel chimique de l'air dissout est modifié de $\varphi_{osm}^{aq} = +RT\ln\omega_l^a$. Ces modifications sont tout autant microscopiques que macroscopique car les différences de potentiel microscopique se répercutent, dans l'ensemble, à l'échelle supérieure.

Le potentiel chimique de l'eau en phase liquide devient :

$$\mu_l^w = \mu_l^{w,0}(T) + \nu_w(P_l - P_0) + \varphi_l^w + M_w g z - RT\omega_l^a \quad (1.18)$$

où $\mu_l^{w,0}(T)$ est le potentiel chimique de l'eau pure à la pression de référence et à la température T . ν_w est le volume molaire, supposé constant, de l'eau liquide. Dans le cas, par exemple, où deux phases eau, l'une pure et l'autre ayant une espèce en solution avec la fraction molaire ω_l^a , sont séparées par une membrane ne laissant passer que l'eau, la pression osmotique est la surpression à appliquer du côté ayant des espèces dissoutes pour que l'eau du côté pur ne migre pas vers elle à travers la membrane.

$$P_{osm} = -\frac{RT}{\nu_w}\omega_l^a \quad (1.19)$$

On peut réécrire la pression osmotique dans le cas d'un seul soluté en concentration C (en mol/l), habituellement suffisamment faible pour que la formule soit valable :

$$P_{osm} \approx RT(10^3 C) \quad (1.20)$$

C'est la formule de *Van't Hoff*. Pour des concentrations raisonnables, par exemple $10^{-3}mol/l$, la pression osmotique est de l'ordre de quelques mètres d'eau.

Ainsi qu'il a été dit au paragraphe sur le potentiel d'écoulement, la contribution du potentiel osmotique C à l'écoulement de l'eau ne fait pas intervenir la perméabilité hydraulique, mais un terme extra-diagonal de la matrice d'Onsager qui doit en principe être mesuré expérimentalement par des protocoles spécifiques. Ce terme ne doit cependant pas être très loin, à quelques facteurs dimensionnels près, de la perméabilité hydraulique.

Écriture de la loi de Darcy à l'aide du potentiel matriciel de l'eau

Le potentiel matriciel est un autre nom pour l'enthalpie libre volumique de la phase liquide. A en croire Philip et de Vries (1957) et Nassar et Horton (1989), ce serait sous l'effet du différentiel de son enthalpie libre, plutôt que de sa charge piézométrique, que la phase liquide se mettrait en mouvement. Ce résultat est textuellement contradictoire avec ce qui a été présenté plus haut. Il a l'avantage de souligner la participation de processus autres que la pression et le poids, et revêt un intérêt pratique, qu'on pourrait trouver acceptable dans certaines conditions.

D'après l'éq. (1.6), l'enthalpie libre d'une phase est la somme pondérée des potentiels chimiques de ses constituants. Si l'on s'intéresse à une phase liquide essentiellement composée d'eau, et dont les éléments en solution représentent une fraction molaire très faible et ne réagissent pas entre eux, on peut négliger la contribution de leur potentiel chimique à l'enthalpie libre de la phase liquide :

$$g_l = \mu_l^w \omega_l^w + \mu_l^a \omega_l^a \approx \mu_l^w \quad (1.21)$$

Le mouvement de l'eau et celui de la phase liquide sont alors confondus. Pour décrire l'écoulement de la phase liquide incompressible, l'idée est alors d'utiliser encore la loi de Darcy en remplaçant la charge hydraulique par le potentiel chimique de l'eau,

volumique cette fois-ci et non pas molaire, homogène à une pression, que l'on appelle *potentiel matriciel* :

$$\phi_l = \frac{1}{\nu_w} \mu_l^w \quad (1.22)$$

ce qui donne :

$$\phi_l = (P_l - P_0) + \frac{\varphi_{w,rev.}}{\nu_w} + \rho_w g z + P_{osm} \quad (1.23)$$

si l'on choisit qu'il soit nul à 1 Bar , à la cote zéro, en l'absence de potentiel de sorption. Le potentiel matriciel est alors (éq. (1.15)) constant à l'équilibre thermodynamique. L'utilisation du gradient de ce potentiel dans la loi de Darcy s'appuie sur l'acceptation d'une seule et même perméabilité hydraulique sous l'effet des pression, sorption, gravité et osmose.

Si l'on néglige la pression différentielle de sorption et la pression osmotique, alors la rétention et la pression capillaire sont confondues, et le potentiel matriciel de l'eau se réduit (à $P_{atm} - P_0$ près) à la charge piézométrique exprimée en Pascals :

$$\phi_l \approx \rho_w g h_l \quad (1.24)$$

où

$$h_l = \frac{P_l - P_{atm}}{\rho_w g} + z \quad (1.25)$$

est la charge piézométrique de l'eau.

Loi de Darcy pour la phase gazeuse

L'usage du potentiel matriciel de la phase gazeuse dans une loi de Darcy est plus problématique que pour la phase liquide. D'une part parce que le volume molaire du gaz est variable, donc le gradient du potentiel matriciel du gaz est différent du gradient de son énergie de Gibbs ; d'autre part parce que la loi de Darcy semble inadaptée à l'écoulement d'un gaz dans le cas général. En effet, si on néglige l'adsorption éventuelle du gaz sur les parois du solide, et qu'on écarte la question de la pression osmotique pour la phase gazeuse, ce qui est probablement justifié, on obtient pour une transformation isotherme et des gaz parfaits,

$$\mathfrak{g}_g = \sum_i \left(RT \ln \frac{P_g^i}{P_0} \right) + \int_{z'=0}^z \bar{M}_g g dz' \quad (1.26)$$

Ceci est assez éloigné de la pression totale de gaz. Le gradient de \mathfrak{g}_g s'écrit donc :

$$\vec{\nabla} \mathfrak{g}_g = \sum_i \left(RT \frac{\vec{\nabla} P_g^i}{P_g^i} \right) + \sum_i \left(R \ln \frac{P_g^i}{P_0} \vec{\nabla} T \right) + \bar{M}_g g \vec{\nabla} z \quad (1.27)$$

C'est en principe ce gradient qu'il faut multiplier par la perméabilité au gaz pour obtenir le flux de gaz. Pour un seul constituant, en milieu isotherme, et à condition que les fluctuations de pression soient relativement faibles, ce gradient devient proportionnel au gradient de charge hydraulique du gaz :

$$\vec{\nabla} \mathfrak{g}_g \approx \nu_g (\vec{\nabla} P_g + \bar{\rho}_g g \vec{\nabla} z) \quad (1.28)$$

Malheureusement, les conditions sont rarement réunies pour que cette formule soit vraie, et l'on fait souvent un usage abusif de l'approximation 1.28. Toutefois, les expérimentations menant à la détermination de la perméabilité relative du gaz en milieu poreux intègrent tous ces effets. Mais le résultat obtenu en isotherme pour du gaz à un seul constituant doit être adapté à d'autres pressions totales de gaz, à un gaz multi-constituants (par exemple air + vapeur), et compte tenu d'un certain gradient thermique. Dans les problèmes de stockage de CO_2 , typiquement, les forts gradients de pression de gaz et l'existence d'un gradient thermique interdisent l'usage de la seule charge hydraulique de gaz pour décrire les écoulement de cette phase.

Dans le modèle adopté pour les simulations, on fait malgré tout pour l'écoulement du gaz la même hypothèse que (1.24). Bien que cette étape soit douteuse, elle n'en est pas moins commode et très répandue. On utilise une forme dérivée de la relation (1.28) :

$$\phi_g \approx \rho_w g h_g \quad (1.29)$$

où
$$h_g = p_g + \frac{\bar{\rho}_g}{\rho_w} z \quad (1.30)$$

qui suppose que les variations de $\bar{\rho}_g$ sont négligeables, c'est-à-dire que l'effet de la compressibilité du gaz est très faible.

1.1.1.3 Transport de l'air et de la vapeur

On aborde ici la question du transport de l'air sec et de la vapeur en phase gazeuse, et de l'air dissout dans l'eau.

Chacun de ces traceurs est transporté par convection (il est entraîné par la phase qui le contient) et par diffusion-dispersion. On regroupe dans ce dernier terme les déplacements sous l'effet de gradients de concentration d'une part (diffusion simple), et sous l'effet des hétérogénéités de vitesse des fluides d'autre part (dispersion).

La question de la dispersion

La dispersion d'un panache est relativement bien comprise en milieu saturé pour différents types d'écoulement [*Rubin 1990* ; *Maugis 1997a* ; *Maugis 1997b*]. Sous certaines conditions, elle s'écrit d'une façon formellement équivalente à de la diffusion, ce qui permet de l'ajouter à la diffusion moléculaire dans les équations de bilan. Elle est par contre très mal connue en milieu non saturé où l'hétérogénéité de la saturation vient s'ajouter, à une autre échelle, aux hétérogénéités du milieu. Des études récentes montrent que l'étalement d'un panache est plus grand en milieu non saturé qu'en milieu saturé, et aussi fortement dissymétrique [*Padilla et al. 1999*]. La dispersion ne s'apparente alors plus à de la diffusion car le régime Fickien n'est pas établi. De plus, on n'est pas encore capable de quantifier cet effet.

C'est pourquoi la dispersion n'est pas prise en compte dans ce modèle et on se limitera à l'expression macroscopique de la diffusion moléculaire.

Loi de Fick

Les flux diffusifs massiques sont obtenus à partir de la loi de Fick, et représentent la déviation du flux d'un constituant par rapport au flux barycentrique de la phase qui le contient (le flux dit "convectif" dans cet exposé). On utilise les diffusivités moléculaires s'appliquant à des fractions molaires pour le système binaire gazeux, et à la masse volumique pour le soluté [Bear et Bachmat 1991, p190]. Pour prendre en compte les effets Soret, osmotiques ou électrostatiques, par exemple, il faut adjoindre à la loi de Fick des termes en gradient des potentiels mis en jeu. On néglige le plus souvent l'effet de la gravité sur la diffusion, dont voici l'expression pour un seul constituant en phase liquide :

$$\vec{j}_C \Big|_{gravite} = -\frac{Mg}{RT} D_l C \vec{\nabla} z \quad (1.31)$$

On peut alors écrire les densités volumiques de flux diffusifs massiques pour les deux constituants au sein des deux phases :

$$\begin{aligned} \vec{j}_v &= -M_v D_g {}^n \rho_g \vec{\nabla} {}^n \omega_g^v \\ \vec{j}_a &= -M_a D_g {}^n \rho_g \vec{\nabla} {}^n \omega_g^a \\ \vec{j}_{aq} &= -D_l \vec{\nabla} {}^m \rho_l^{aq} \\ \vec{j}_w &= -D_l \vec{\nabla} {}^m \rho_l^w \end{aligned} \quad (1.32)$$

les D_g et D_l étant les coefficients de diffusion effectifs dans les phases gazeuse et liquide respectivement. On en donne les expressions dans le paragraphe suivant.

Comme $\omega_g^a + \omega_g^v = 1$, on en déduit immédiatement que $\vec{j}_a/M_a = -\vec{j}_v/M_v$, ce qui signifie que le flux total molaire dû à la diffusion est nul. Ce n'est autre que l'expression de l'hypothèse – sur laquelle repose la loi de Fick en système binaire – qui suppose que la diffusion a lieu sans variation locale de la pression totale de gaz [Bear et Bachmat 1991], ou qu'en tous cas, ces variations sont suffisamment faibles et compensées suffisamment rapidement par des courants contraires pour être négligées.

On a de même $\vec{j}_{aq}/M_a = -\vec{j}_w/M_v$. Dans certains cas, la diffusion de l'eau en phase liquide peut être importante.

N.B. : si les flux diffusifs avaient été écrits en fonction des fractions massiques, l'égalité $\vec{j}_a = -\vec{j}_v$ aurait signifié que la diffusion a lieu sans variation locale de la *masse* de matière. Les masses molaires de l'air et de la vapeur étant différentes, la pression totale de gaz ne serait pas conservée.

C'est pourtant le choix qu'ont fait Pollock (1986) et Thomas [Volckaert et al. 1996a, quoiqu'avec une variante]. C'est pourquoi, dans un premier temps et en vue de

comparaison de résultats de calcul, le modèle de diffusion fonction des gradients de fractions massiques a également été implémenté :

$$\begin{aligned}\vec{j}_v &= -\rho_g D_g \vec{\nabla}^m \omega_g^v \\ \vec{j}_a &= -\rho_g D_g \vec{\nabla}^m \omega_g^a \\ \vec{j}_{aq} &= -\rho_w D_l \vec{\nabla}^m \omega_l^{aq} \\ \vec{j}_w &= \vec{0}\end{aligned}\tag{1.33}$$

Ainsi, dans le cadre de cette écriture, ${}^m\vec{j}_v = -{}^m\vec{j}_a$, donc ${}^n\vec{j}_g = {}^n\vec{j}_v + {}^n\vec{j}_a = (1 - M_v/M_a) {}^n\vec{j}_v$. Il y a donc un flux diffusif net de gaz d'environ 0,4 ${}^n\vec{j}_v$, ce qui est relativement important. En zone désaturée, la perméabilité au gaz est très grande, donc le transfert compensatoire par convection, prévu plus haut, a lieu quand même très rapidement, de sorte que l'on conserve les ordres de grandeur des flux diffusifs des gaz. Il n'en va pas de même en zone peu désaturée, comme dans la frange d'extension de la bulle de vapeur, où les transferts de vapeur et d'air sont surestimés. Il en résulte une importance substantiellement accrue donnée à l'effet caloduc, et donc une sous-estimation de la cinétique de formation de la bulle.

Coefficient de diffusion effectif

La diffusion moléculaire d_0 correspond à l'étalement spontané d'un soluté en milieu infini d'une phase. Elle dépend de la température et de la pression, et doit être corrigée par différents facteurs provenant du fait qu'on est en milieu poreux diphasique à deux constituants. En pratique, on utilise la diffusivité effective dans chaque phase. Reprenant la terminologie de [Banton et Bangoy 1997], on écrit :

$$\begin{aligned}D_g &= \nu_{tm} \omega d_{0g} / \tau_g \\ D_l &= \omega d_{0l} / \tau_l\end{aligned}\tag{1.34}$$

ν_{tm} est le coefficient de transfert de masse, supérieur à 1. Thomas [Volckaert et al. 1996a, p368] utilise l'expression suivante :

$$\nu_{tm} = \frac{P_a}{P_a - P_v}\tag{1.35}$$

qui tient compte des pressions partielles des deux constituants gazeux. L'inconvénient de cette expression est qu'elle n'est valide qu'aux faibles pressions de vapeur, en régime permanent, pour un système fermé entre une source de vapeur et un condenseur, et finalement, aux valeurs de ν_{tm} proche de l'unité, ce qui limite son intérêt. On voit immédiatement qu'on ne peut pas l'utiliser lorsque c'est l'air qui est minoritaire par rapport à la vapeur. En conséquence, ce facteur n'est pas pris en compte ici.

Les τ_j sont les tortuosités (supérieures à 1) de chaque phase. Elles pondèrent la diffusivité du fait de la complexité du cheminement imposé aux particules par la

géométrie et la connectivité de la phase. Elles dépendent en principe de la direction considérée (ce sont des tenseurs), mais on supposera qu'elles sont isotropes. Et elles dépendent aussi du niveau de saturation de chaque phase, mais on approximera ces valeurs à celle du milieu poreux saturé : $\tau_g(\theta_g) = \tau_l(\theta_l) = \tau = cste$. Il existe de nombreuses autres définitions de la tortuosité, mais retenons surtout celle de [De Marsily 1986 ; Bear et Bachmat 1991] qui a un certain succès, et qui définit la tortuosité comme le rapport D_j/d_{0j} .

1.1.1.4 Transport de la chaleur

Le transport de chaleur dans le milieu se fait par convection et conduction. En milieu hétérogène, le traitement à une échelle homogénéisée nécessite l'introduction de la dispersion. Cependant, les questions posées par la dispersion de panache dans l'eau et dans le gaz n'ont pas plus de réponse lorsque qu'il s'agit du transport de chaleur. C'est pourquoi on ne tient pas compte ici de la dispersion thermique.

Le flux conductif de chaleur est donné par la loi de Fourier :

$$\vec{j}_Q = -\bar{\lambda}\vec{\nabla}T \quad (1.36)$$

où $\bar{\lambda}$ est la conductivité thermique effectif du milieu poreux. Elle dépend de la saturation suivant une loi que l'on a choisie linéaire.

En plus de la conduction thermique, qui pour être cohérent, devrait être mesurée en statique avec des fluides purs, la chaleur est convectée par l'eau, l'air dissout, l'air sec gazeux et la vapeur d'eau dans leurs composantes convectives et diffusives. Ces termes supplémentant la conduction pure sont qualifiés de "convectifs". Le transport convectif d'enthalpie est alors :

$$\begin{aligned} &(\rho_w {}^m\mathfrak{h}_w + \rho_{aq} {}^m\mathfrak{h}_{aq})\vec{U}_l + (\rho_a {}^m\mathfrak{h}_a + \rho_v {}^m\mathfrak{h}_v)\vec{U}_g \\ &+ \rho_{aq} {}^m\mathfrak{h}_{aq}\vec{j}_{aq} + \rho_a {}^m\mathfrak{h}_a\vec{j}_a + \rho_v {}^m\mathfrak{h}_v\vec{j}_v + \rho_w {}^m\mathfrak{h}_w\vec{j}_w \end{aligned} \quad (1.37)$$

où les termes ${}^m\mathfrak{h}_i$ désignent les enthalpies massiques de chaque constituant i .

1.1.1.5 Lois constitutives

Loi des gaz parfaits

Un gaz parfait vérifie la relation :

$$P_g^i \nu_g^i = RT \quad (1.38)$$

qui met en jeu sa pression partielle P_g^i et son volume molaire ν_g^i . Il en résulte qu'un mélange de gaz parfaits est encore un gaz parfait. On peut réécrire (1.38) à l'aide de la masse volumique :

$$P_g^i M_i = \rho_i RT \quad (1.39)$$

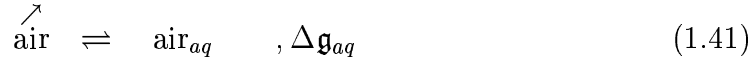
ou

$$P_g^i = \rho_i R_i T \quad (1.40)$$

en ayant posé $R_i = R/M_i$.

Loi de Henry pour l'air aqueux

La loi de Henry relie la pression d'air sec en phase gazeuse à la fraction molaire d'air dissout en phase aqueuse. Comme on va le voir, elle n'est rien d'autre que l'expression de l'équilibre thermodynamique de la réaction chimique :



Δg_{aq} est l'enthalpie libre de dissolution. Dans ce cas où les coefficients stoechiométriques valent 1, la constante de cette équilibre chimique est égale au rapport des activités de l'air dissout et de l'air gazeux respectivement. La première peut être approchée par la fraction molaire de l'air en phase liquide ω_{aq} , cas général des espèces dissoutes à l'état de trace ; et la seconde vaut la pression d'air gazeux P_a normalisée par la pression de référence P_O . De plus, la loi d'Arrhénius exprime la valeur de la constante d'équilibre en fonction de Δg_{aq} et de la température. On obtient ainsi, en écrivant de deux manières différentes la constante de l'équilibre (1.41) (sans dimension) :

$$\frac{\omega_{aq}}{P_a/P_{atm}} = \exp(-\Delta g_{aq}/RT) \quad (1.42)$$

On en déduit une relation entre les masses volumiques des deux constituants dans leur phase :

$$\rho_{aq} = k_H \rho_a \quad (1.43)$$

avec la constante de Henry k_H (sans dimension) pour l'air en solution dans l'eau :

$$k_H = \frac{\nu_{atm}(T)}{\nu_w} \exp(\Delta g_{aq}/RT) \quad (1.44)$$

où $\nu_{atm}(T)$ est le volume molaire d'un gaz parfait à la température T et à la pression atmosphérique :

$$\nu_{atm}(T) = \frac{RT}{P_{atm}} \quad (1.45)$$

En principe, Δg_{aq} dépend de la température par la relation $\Delta g_{aq} = \Delta h_{aq}^0 + T\Delta s_{aq}^0$, ce qui donne la loi de variation de la constante de Henry avec la température, Δh_{aq}^0 et Δs_{aq}^0 étant supposés connus. On introduit cependant peu d'erreur en supposant k_H constant ; hypothèse retenue ici.

Remarquons de plus que l'usage de la loi de Henry sous sa forme (1.43) n'est valide qu'à condition que l'activité de l'air dissout soit égale à sa fraction molaire. Lorsque le milieu se désature de son eau et que le nombre de moles d'eau liquide tend vers zéro, l'air dissout ne se trouve plus à l'état de trace et son activité diffère sérieusement

de sa fraction molaire, de sorte que la loi de Henry (1.43) n'est plus valable. En tout état de cause, si l'air se trouve en phase liquide alors qu'il n'y a plus d'eau liquide, on a affaire à de l'air liquide. La pression d'air est alors égale à la pression saturante d'air à la température donnée. C'est une valeur extrêmement élevée compte tenu de la très faible température de vaporisation de l'air à pression atmosphérique, pression qui reste inaccessible dans les problèmes classiques. Donc, aux pressions de gaz modérément élevées auxquelles on s'attend, l'air dissout reste probablement à l'état de trace jusqu'à vaporisation complète de l'eau, ce qui autorise, dans notre cas particulier, à continuer d'utiliser la loi de Henry sous sa forme (1.43).

Loi de Clausius-Clapeyron sur la chaleur latente de fusion

La loi de Clausius-Clapeyron relie la pression de vapeur saturante à la chaleur latente molaire de vaporisation :

$$\frac{dP_v^0}{dT} = \frac{L_v}{T(\nu_v - \nu_w)} \quad (1.46)$$

Elle peut être utilisée au choix pour déterminer la pression de vapeur saturante compte tenu d'une chaleur latente de fusion indépendante de la température, ou inversement pour calculer la chaleur latente de fusion étant donnée une loi de variation de la pression de vapeur saturante avec la température. Dans le cas précis de cette étude, les deux grandeurs sont données indépendamment, si bien que la loi ci-dessus n'est pas utilisée.

Expression des enthalpies

Pour les gaz parfaits comme pour l'eau et le solide incompressibles, l'enthalpie est indépendante des variations de pression à température constante. Pour l'air aqueux, dont la contribution au bilan thermique est dérisoire, on peut sans trop d'imprécision faire la même hypothèse. On a alors pour tous les constituants ainsi que pour le solide :

$$d\mathfrak{h}_i = c_i dT \quad (1.47)$$

c'est-à-dire que les enthalpies ne dépendent pas de la pression.

Ainsi,

$$\mathfrak{h}_i = \mathfrak{h}_i^0 + \int_{T_0}^T c_i dT \quad (1.48)$$

où \mathfrak{h}_i^0 est l'enthalpie standard du constituant i dans sa phase. Par convention, à $T_0 = 298K$, l'enthalpie du constituant stable et pur à cette température doit valoir zéro. C'est-à-dire que $\mathfrak{h}_s^0 = 0$, $\mathfrak{h}_w^0 = 0$ et $\mathfrak{h}_a^0 = 0$. De plus, par définition des chaleurs latentes de changement de phase,

$$L_v(T) = \mathfrak{h}_v(P_v^0(T), T) - \mathfrak{h}_w(P_v^0(T), T) \quad (1.49)$$

$$= \mathfrak{h}_v^0 + \int_{T_0}^T (c_v - c_w) dT \quad (1.50)$$

ce qui donne

$$\mathfrak{h}_v^0 = L_v(T) + \int_{T_0}^T (c_w - c_v) dT \quad (1.51)$$

$$= cste \quad (1.52)$$

$$= L_v(T_0) \quad (1.53)$$

En suivant la même démarche avec l'air gazeux et l'air aqueux, on arrive aux expressions des enthalpies :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{h}_s = \int_{T_0}^T c_s dT \\ \mathfrak{h}_w = \int_{T_0}^T c_w dT \\ \mathfrak{h}_v = \int_{T_0}^T c_v dT + L_v(T_0) \\ \mathfrak{h}_a = \int_{T_0}^T c_a dT \\ \mathfrak{h}_{aq} = \int_{T_0}^T c_{aq} dT + L_d(T_0) \end{array} \right. \quad (1.54)$$

et on connaît accessoirement les lois de variation des chaleurs latentes :

$$L_v(T) = L_v(T_0) + \int_{T_0}^T (c_v - c_w) dT \quad (1.55)$$

$$L_d(T) = L_d(T_0) + \int_{T_0}^T (c_{aq} - c_a) dT \quad (1.56)$$

La chaleur latente de dissolution L_d est faible et n'est rapportée ici que pour mémoire car elle est négligée dans la plupart des problèmes.

Loi de Kelvin

La loi de Kelvin rend compte de la perturbation engendrée sur l'équilibre liquide-vapeur par la pression capillaire. Plus précisément, elle relie l'humidité relative – le rapport entre la pression partielle de vapeur et la pression de vapeur saturante de l'eau – à la pression capillaire et la température. Sa démonstration est présentée dans de nombreux ouvrages (par ex. [Bear et Bachmat 1991]). En voici le résultat :

$$\mathcal{H} = \frac{P_v}{P_v^0} = \exp\left(-\frac{\nu_w P_c}{RT}\right) = \exp\left(\frac{\psi g}{R_v T}\right) \quad (1.57)$$

Cette formule est obtenue à partir de l'égalité des potentiels chimiques à l'équilibre inter-phases. Elle est valable dans le cas où l'eau est incompressible, la vapeur est un gaz parfait, il n'y a ni osmose, ni adsorption d'eau sur le solide, le volume molaire de l'eau liquide est négligeable à toute saturation devant celui du gaz, le système est fermé et isochore (sans variation de volume) et sans air sec.

Dans ces conditions, la pression de vapeur est décrie de la quantité $(\mathcal{H} - 1)P_v^0$ et la pression d'eau de $(\mathcal{H} - 1)P_v^0 - P_c$. Les états d'équilibre des phases de l'eau sont

décrits par un diagramme de phase ayant comme axes, par exemple, la pression et le volume molaire moyen du système \bar{v} . Ce dernier est la moyenne harmonique des volumes molaire de chaque phase :

$$\frac{\omega}{\bar{v}} = \frac{\theta}{\nu_w} + \frac{\omega - \theta}{\nu_v} \quad (1.58)$$

où θ est la teneur en eau (le volume d'eau par unité de volume de milieu poreux) et est comprise entre zéro (ou la teneur en eau irréductible θ_r selon les modèles), et la porosité ω . La figure 1.3 montre le diagramme de phase de l'eau modifié par la pression capillaire.

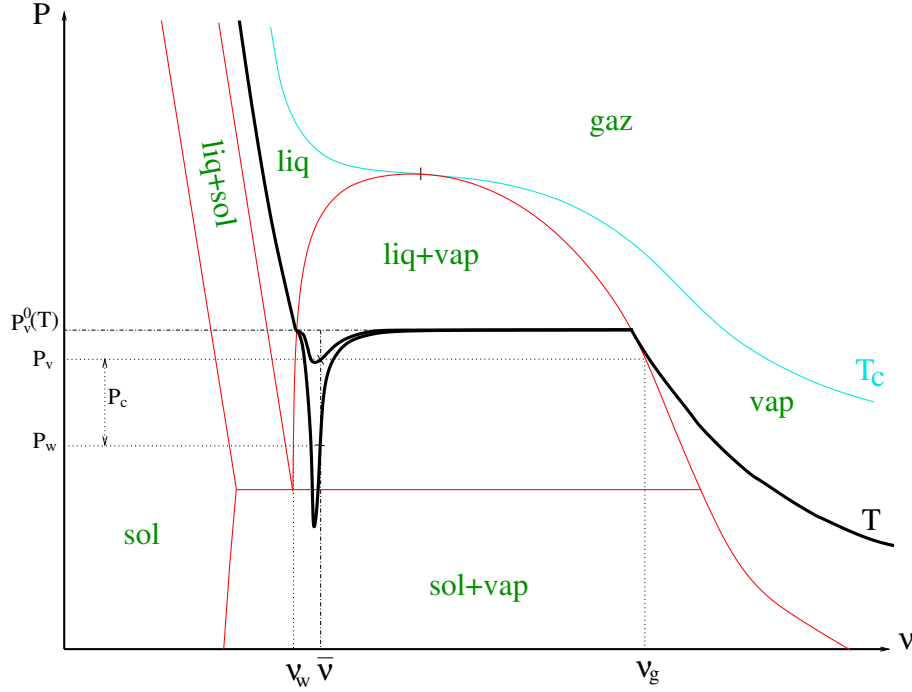


FIG. 1.3: Diagramme de phase de l'eau perturbé par la pression capillaire.

Remarquons que si la pression capillaire tend vers l'infini à désaturation totale (en eau), la pression de vapeur tend vers zéro et, en l'absence d'air sec, cela signifie qu'il n'y a plus de gaz. Ceci est contradictoire et le diagramme de phase n'est pas défini dans cette zone. Si, comme on l'a vu plus haut, la pression capillaire tend vers zéro à désaturation, la pression de vapeur et la pression d'eau sont égales à la pression de vapeur saturante. La courbe de passage eau+vapeur / vapeur n'est donc pas modifiée. Lorsque le volume molaire du système croît (c'est la moyenne harmonique des volumes molaires de l'eau et de la vapeur, éq. (1.58)), la fraction de vapeur augmente. Un volume molaire donné correspond ainsi à un certain niveau de saturation, et donc à une pression capillaire. La loi de Kelvin (1.57) donne alors la pression de vapeur via l'humidité relative, et donc la pression d'eau par la relation $P_w = P_g - P_c$. Du fait de la combinaison

harmonique des volumes molaires et du rapport très grand entre ceux des deux phases (trois ordres de grandeur), les saturations moyennes sont rassemblées aux petits volumes molaires, ce qui fait que l'influence de la pression capillaire sur le diagramme de phase est limitée à une petite zone aux faibles volumes molaires.

Si l'on tient compte de l'élévation de température engendrée par la condensation de vapeur en présence de pression capillaire, et si l'on suppose que ni le potentiel de surface, ni la fraction d'air dissout (et donc la pression osmotique) ne sont affectés par la pression capillaire, on obtient une nouvelle loi de Kelvin, plus générale, simplement en remplaçant dans la relation (1.57) P_v^0 par sa valeur à la température finale ; laquelle reste à déterminer.

La loi de Kelvin ne suffit malheureusement pas à donner une loi de variation de la pression capillaire avec la température pour une teneur en eau donnée. En dérivant (1.57) par rapport à T à humidité constante, on obtient :

$$\left(\frac{\partial P_c}{\partial T}\right)_\mathcal{H} = \frac{P_c}{T} \quad (1.59)$$

Il manque encore $\left(\frac{\partial P_c}{\partial \mathcal{H}}\right)_T$ ou $\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial T}\right)_\theta$ pour connaître P_c .

La question de la métastabilité de l'eau

Lorsque l'on chauffe de l'eau dans une casserole pour préparer des œufs à la coque, l'eau ne se met pas à bouillir à 100°C, mais à une température légèrement plus élevée. Dans cet intervalle de température, elle est dans un état métastable. C'est-à-dire que son énergie est localement plus faible sous forme d'eau pure que sous forme d'eau liquide et de vapeur : pour former une phase vapeur, l'énergie du mélange (le système formé par l'eau et l'embryon de phase vapeur candidate) doit augmenter et passer par un maximum avant de pouvoir diminuer vers un état globalement stable. Tant que le système ne reçoit pas l'énergie suffisante pour franchir ce saut, la phase vapeur n'apparaît pas. Par contre, si on refroidit un système diphasique eau-vapeur, la phase vapeur va disparaître continûment, et le système sera stable tout le long de la transformation [*Carey 1996* ; *Jamet 1998*]. La métastabilité de l'eau introduit donc un effet hystérétique.

Il va de soi qu'un phénomène similaire se produit lorsque l'on refroidit de la vapeur surchauffée.

L'existence d'une phase métastable est une situation typique où le système est cinétiquement stable. On en rencontre de nombreux exemples en chimie. Un tel état n'existe que temporairement car, lorsque l'on fait l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique stable, on suppose que le système évolue vers son niveau d'énergie le plus bas globalement. L'eau et la vapeur ne peuvent alors pas être métastables, ce qui

élimine au passage le traitement éventuel de l'hystérésis de l'équilibre eau-vapeur. On peut par contre se poser la question de la pertinence de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique stable en étudiant la probabilité que la stimulation à apporter au système pour qu'il quitte son état métastable lui soit fournie. Ceci n'est pas fait ici.

1.1.1.6 Lois de conservation

Les trois bilans suivants (eau, air et chaleur) sont écrits par unité de volume.

Conservation de la quantité totale d'eau

L'eau se trouve en phase liquide et sous forme de vapeur. Sa quantité par unité de volume est $\theta_l \rho_w + \theta_g \rho_v$. Elle est transportée par convection de ces deux phases, ainsi que par diffusion en phase gazeuse. L'écriture du bilan sur la quantité totale d'eau permet de s'affranchir des termes de transfert entre phases (à savoir la vaporisation et la condensation). L'équation de conservation de la masse d'eau s'écrit alors :

$$\boxed{\frac{\partial(\theta_l \rho_w + \theta_g \rho_v)}{\partial t} + \text{div} \left(\rho_w \vec{U}_l + \vec{j}_w + \rho_v \vec{U}_g + \vec{j}_v \right) = {}^v Q_{w+v}} \quad (1.60)$$

où ${}^v Q_{w+v}$ est le terme source total pour l'eau (en masse d'eau par unité de temps et par unité de volume de milieu poreux).

Terme de condensation La masse d'eau se condensant par unité de temps et de volume de milieu poreux s'obtient facilement à partir de l'équation de conservation de l'eau liquide par exemple :

$${}^v Q_{v \rightarrow w} = \frac{\partial \theta_l \rho_w}{\partial t} + \text{div} \left(\rho_w \vec{U}_l + \vec{j}_w \right) - {}^v Q'_w \quad (1.61)$$

où ${}^v Q'_w$ est le terme source spécifique à l'eau liquide (en masse d'eau liquide par unité de temps et par unité de volume de milieu poreux), condensation exclue.

Conservation de la quantité totale d'air

L'air se trouve dans la phase gaz (air sec) et dans la phase liquide (air aqueux ou dissout). Sa quantité par unité de volume est $\theta_g \rho_a + \theta_l \rho_{aq}$. Il est transporté par convection du gaz et du liquide et par diffusion au sein de ces deux phases :

$$\boxed{\frac{\partial(\theta_g \rho_a + \theta_l \rho_{aq})}{\partial t} + \text{div} \left(\rho_a \vec{U}_g + \rho_{aq} \vec{U}_l + \vec{j}_a + \vec{j}_{aq} \right) = {}^v Q_{a+aq}} \quad (1.62)$$

où ${}^v Q_{a+aq}$ est le terme source total pour l'air (en masse d'air par unité de temps et par unité de volume de milieu poreux).

Terme de dissolution De même, on obtient aisément la masse d'air se dissolvant par unité de temps et de volume de milieu poreux :

$${}^vQ_{a \rightarrow aq} = {}^vQ'_a - \frac{\partial \theta_g \rho_a}{\partial t} - \text{div} \left(\rho_a \vec{U}_g + \vec{j}_a \right) \quad (1.63)$$

où ${}^vQ'_a$ est le terme source spécifique à l'air gazeux (en masse d'air gazeux par unité de temps et par unité de volume de milieu poreux), exhalaison exclue.

Conservation de l'énergie dans son écriture enthalpique

On rappelle (§1.1.1.2) que l'énergie interne d'un système est définie par $d\mathcal{U} = \delta\mathcal{Q} + \delta\mathcal{W}$, où \mathcal{W} est le travail exercé sur le système par l'ensemble des forces d'expansion ($\delta\mathcal{W}_m = -PdV$), à courte portée ($\delta\mathcal{W}_{CP} = -d\varphi$ par exemple) et à longue portée (gravité $\delta\mathcal{W}_{LP} = -\rho g dz$ entre autres) :

$$\delta\mathcal{W} = \delta\mathcal{W}_m + \delta\mathcal{W}_{CP} + \delta\mathcal{W}_{LP} \quad (1.64)$$

On obtient, en utilisant l'enthalpie $\mathfrak{H} = \mathcal{U} + PV$, et en rappelant que l'ensemble des travaux non expansifs $\delta\mathcal{W}_{CP} + \delta\mathcal{W}_{LP}$ s'écrit $\delta\mathcal{W}_{non\ exp.}$.

$$d\mathfrak{H} - VdP = \delta\mathcal{Q} + \delta\mathcal{W}_{non\ exp.} \quad (1.65)$$

Appliquons l'égalité (1.65) à chaque phase et par unité de volume de milieu poreux à partir de l'enthalpie massique ${}^m\mathfrak{h}$:

$$d(\theta_j \rho_j {}^m\mathfrak{h}_j) - \theta_j dP_j = \delta(\theta_j {}^v\mathfrak{q}_j) + \delta(\theta_j {}^v\mathfrak{w}_{j, non\ exp.}) \quad (1.66)$$

où ${}^v\mathfrak{q}_j$ et ${}^v\mathfrak{w}$ sont respectivement la source de chaleur et le travail reçus par la phase j par unité de volume de cette phase. En sommant la formule (1.66) sur les trois phases solide, liquide et gazeuse, on obtient l'équation de bilan énergétique du système complet :

$$\begin{aligned} d[(1-\omega)\rho_s {}^m\mathfrak{h}_s + \theta_l(\rho_w {}^m\mathfrak{h}_w + \rho_{aq} {}^m\mathfrak{h}_{aq}) + \theta_g(\rho_v {}^m\mathfrak{h}_v + \rho_a {}^m\mathfrak{h}_a)] - \theta_l dP_l - \theta_g dP_g \\ = \delta\mathfrak{q} + \delta\mathfrak{w}_{non\ exp.} \end{aligned} \quad (1.67)$$

Dans un soucis de simplification d'écriture, on abandonnera dorénavant les indices m mentionnant que les enthalpies et les chaleurs latentes sont massiques.

Fraction irréversible des échanges thermiques Les processus irréversibles renforcent la fraction irréversible, c'est-à-dire non restituable en chaleur (donc non réutilisable par d'autres processus), de l'entropie par rapport à l'entropie totale. Les phénomènes diffusifs en sont typiquement un exemple. En particulier, la diffusion thermique \vec{j}_Q est un facteur de dissipation de chaleur irréversible, mais la propagation d'énergie sous l'effet du transport diffusif des constituants ou l'hystérésis de sorption $\delta\varphi_{irr.}$ en sont d'autres aussi.

Écriture du bilan L'équation de conservation de la chaleur au cours du temps s'obtient en sommant la conservation de chacun des termes de l'expression (1.67), à savoir une dérivée partielle temporelle, la divergence des flux, et le terme source spécifique au constituant considéré. On explicite d'abord les contributions de chacun des termes enthalpiques de gauche. Les produits $\theta_j \rho_i \mathfrak{h}_i$ sont dérivés par partie en $\mathfrak{h}_i \frac{\partial \theta_j \rho_i}{\partial t} + \theta_j \rho_i \frac{\partial \mathfrak{h}_i}{\partial t}$. Comme les enthalpies ne dépendent que de la température (équ. (1.54)), on peut écrire $\frac{\partial \mathfrak{h}_i}{\partial t} = \frac{d\mathfrak{h}_i}{dT} \frac{\partial T}{\partial t}$. Mais il faut tenir compte du terme constant de changement de phase L_v et L_d pour la vapeur et l'air aqueux respectivement, qui amènent une contribution énergétique proportionnelle aux apports de ces constituants sous leur forme spécifique ${}^v Q'_v$ et ${}^v Q'_a$. De plus, les enthalpies de chaque constituant sont transportées par convection \vec{U}_j de la phase et par diffusion \vec{j} au sein de la phase. Par exemple, la conservation du terme $d\theta_l \rho_w \mathfrak{h}_w$ est la suivante :

$$\mathfrak{h}_w \frac{\partial(\theta_l \rho_w)}{\partial t} + \theta_l \rho_w \frac{d\mathfrak{h}_w}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div} \left(\mathfrak{h}_w (\rho_w \vec{U}_l + \vec{j}_w) \right) = {}^v Q_{h_w} \quad (1.68)$$

En sommant toutes les contributions, on obtient alors :

$$\begin{aligned} & \mathfrak{h}_w \frac{\partial(\theta_l \rho_w)}{\partial t} + \mathfrak{h}_{aq} \frac{\partial(\theta_l \rho_{aq})}{\partial t} + \mathfrak{h}_v \frac{\partial(\theta_g \rho_v)}{\partial t} + \mathfrak{h}_a \frac{\partial(\theta_g \rho_a)}{\partial t} \\ & + \left((1 - \omega) \rho_s \frac{d\mathfrak{h}_s}{dT} + \theta_l \rho_w \frac{d\mathfrak{h}_w}{dT} + \theta_l \rho_{aq} \frac{d\mathfrak{h}_{aq}}{dT} + \theta_g \rho_v \frac{d\mathfrak{h}_v}{dT} + \theta_g \rho_a \frac{d\mathfrak{h}_a}{dT} \right) \frac{\partial T}{\partial t} \\ & + \text{div} \left[\mathfrak{h}_w (\rho_w \vec{U}_l + \vec{j}_w) + \mathfrak{h}_{aq} (\rho_{aq} \vec{U}_l + \vec{j}_{aq}) + \mathfrak{h}_v (\rho_v \vec{U}_g + \vec{j}_v) + \mathfrak{h}_a (\rho_a \vec{U}_g + \vec{j}_a) + \vec{j}_Q \right] \\ & - \theta_l \left(\frac{\partial P_l}{\partial t} + \text{div} \vec{U}_l P_l \right) - \theta_g \left(\frac{\partial P_g}{\partial t} + \text{div} \vec{U}_g P_g \right) \\ & = {}^v Q_T \end{aligned} \quad (1.69)$$

les différents termes sources sont cumulés en ${}^v Q_T$, le terme source thermique volumique total du système, qui vaut :

$${}^v Q_T = {}^v Q_\Omega + {}^v Q'_v L_v + {}^v Q'_a L_d + \delta {}^v Q_{\mathfrak{W}_{non\ exp.}} / \delta t \quad (1.70)$$

où ${}^v \Omega$ est la chaleur volumique apportée au système ($J/m^3 s$), comme l'énergie dissipée par une résistance chauffante, en dehors des contributions de chaleur latente. ${}^v Q'_v$ et ${}^v Q'_a$ sont les masses respectives de vapeur et d'air dissout apportées au système ($kg/m^3 s$). ${}^v Q_{\mathfrak{W}_{non\ exp.}}$ contient, comme on l'a écrit un peu plus haut, les travaux volumiques ($J/m^3 s$), éventuellement irréversibles, des forces de sorption et de gravité.

En pratique, on néglige les termes de conservation des pressions des phases, en raison de la difficulté à les prendre en compte numériquement.

Benet et Jouanna (1983) ont proposé une écriture de ces équations de conservation sous un formalisme thermodynamique faisant appel aux coefficients de la matrice d'Onsager.

Écriture des lois de conservation en fonction des variables principales

Le choix des variables principales est lié à des contraintes numériques ou est relatif à un problème physique donné. Celles que Pollock a utilisé dans son cas de référence [Pollock 1986] sont la succion ψ , la pression réduite de gaz p_g , et la température T . On éliminera les autres variables de la plupart des dérivées, quoiqu'en conservant l'écriture de certains termes suivant l'importance qu'on leur prête. Dans ce qui suit, lorsqu'on écrit une dérivée partielle par rapport à une variable, on suppose implicitement que cette dérivée est calculée avec les deux autres variables constantes.

En s'appuyant sur la loi de Kelvin (1.57), la loi de Henry (1.43), la loi des gaz parfaits (1.40), les lois de Darcy généralisées (1.1) assorties des expressions simplifiées des potentiels matriciels (1.24) et (1.29), les lois de Fick (1.32) avec les valeurs de diffusivité effectives correspondantes (1.34) et la loi de Fourier (1.36), on obtient :

$$\begin{aligned}
\theta_l &= \theta \\
\theta_g &= \omega - \theta \\
P_v &= \rho_v R_v T \quad \text{où } R_v = R/M_v \\
&= P_v^0(T) \exp \frac{\psi g}{R_v T} \\
P_a &= \rho_a R_a T \quad \text{où } R_a = R/M_a \\
P_g &= P_a + P_v \\
\rho_a &= \frac{P_g - P_v}{R_a T} \\
\rho_{aq} &= k_H \rho_a \\
\vec{U}_l &= -K_w \vec{\nabla}(\psi + p_g + z) \\
\vec{U}_g &= -K_g(\vec{\nabla} p_g + \frac{\rho_g}{P_g} \vec{\nabla} z) \\
\vec{j}_v &= -M_v D_g \rho_g \vec{\nabla} \omega_g^v \\
&= -D_g \rho_g \frac{M_v}{M_g} \vec{\nabla} \frac{P_v}{P_g} \\
&= -D_g \rho_g \frac{M_v}{M_g} \frac{1}{P_g} \left(\frac{\partial P_v}{\partial \psi} \vec{\nabla} \psi - \frac{\rho_w g P_v}{P_g} \vec{\nabla} p_g + \frac{\partial P_v}{\partial T} \vec{\nabla} T \right) \\
\vec{j}_a &= -\frac{M_a}{M_v} \vec{j}_v \\
\vec{j}_{aq} &= -D_l \rho_w \vec{\nabla} m_{\omega_l^{aq}} \quad \text{avec } \vec{\nabla} m_{\omega_l^{aq}} = \frac{k_H}{\rho_w} \vec{\nabla} \rho_a \\
\vec{j}_w &= -\frac{M_v}{M_g} \vec{j}_{aq} \\
\vec{j}_Q &= -\bar{\lambda} \vec{\nabla} T
\end{aligned} \tag{1.71}$$

Les dérivées en temps doivent également se ramener aux dérivées temporelles des

trois variables, lorsque cela est jugé utile (lorsque les termes sont dominants) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta}{\partial t} &= \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \\ \frac{\partial \rho_a}{\partial t} &= \frac{\partial \rho_a}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \rho_a}{\partial p_g} \frac{\partial p_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_a}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \\ \frac{\partial \rho_v}{\partial t} &= \frac{\partial \rho_v}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \rho_v}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}\end{aligned}\quad (1.72)$$

car la saturation ne dépend en général pas de la pression de gaz à succion donnée.

Le calcul des dérivées des pressions et des masses volumiques par rapport aux trois variables est alors nécessaire :

$$\begin{aligned}\frac{\partial P_v}{\partial \psi^*} &= \begin{cases} 0 & \text{si } \psi^* > 0 \\ g\rho_v & \text{si } \psi^* \leq 0 \end{cases} ; \quad \frac{\partial P_v}{\partial p_g} = 0 ; \quad \frac{\partial P_v}{\partial T} = R_v H(\rho_v^0 + T \frac{d\rho_v^0}{dT}) - \frac{\rho_v g \psi}{T} \\ \frac{\partial \rho_v}{\partial \psi^*} &= \begin{cases} 0 & \text{si } \psi^* > 0 \\ \frac{\rho_v g}{R_v T} & \text{si } \psi^* \leq 0 \end{cases} ; \quad \frac{\partial \rho_v}{\partial p_g} = 0 ; \quad \frac{\partial \rho_v}{\partial T} = H \frac{d\rho_v^0}{dT} - \frac{\rho_v g \psi}{R_v T^2} \\ \frac{\partial \rho_a}{\partial \psi^*} &= -\frac{R_v}{R_a} \frac{\partial \rho_v}{\partial \psi} ; \quad \frac{\partial \rho_a}{\partial p_g} = \frac{\rho_w g}{R_a T} ; \quad \frac{\partial \rho_a}{\partial T} = -\frac{P_g}{R_a T^2} - \frac{R_v}{R_a} \frac{\partial \rho_v}{\partial T} \\ &= -\frac{\rho_v g}{R_a T} ; \quad = \frac{\rho_w g}{R_a T} ; \quad = -\frac{P_g + \rho_v g \psi}{R_a T^2} - \frac{R_v}{R_a} H \frac{d\rho_v^0}{dT}\end{aligned}\quad (1.73)$$

Ceci donne la forme désirée des équations de conservation (1.60), (1.62) et (1.69) :

$$\boxed{\begin{cases} C_w^\psi \frac{\partial \psi}{\partial t} + \text{div}(-D_w^\psi \vec{\nabla} \psi) = \text{div}\left(D_w^{p_g} \vec{\nabla} p_g + D_w^T \vec{\nabla} T + D_w^z \vec{\nabla} z\right) + E_w \\ C_a^{p_g} \frac{\partial p_g}{\partial t} + \text{div}(-D_a^{p_g} \vec{\nabla} p_g) = \text{div}\left(D_a^\psi \vec{\nabla} \psi + D_a^T \vec{\nabla} T + D_a^z \vec{\nabla} z\right) + E_a \\ C_T^T \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(-D_T^T \vec{\nabla} T) = \text{div}\left(D_T^\psi \vec{\nabla} \psi + D_T^{p_g} \vec{\nabla} p_g + D_T^z \vec{\nabla} z\right) + E_T \end{cases}}\quad (1.74)$$

avec, pour l'équation en succion :

$$\begin{aligned}C_w^\psi &= \rho_w \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \\ D_w^\psi &= K_w \rho_w + \mathcal{D}_\psi^v + \mathcal{D}_\psi^w \\ D_w^{p_g} &= K_w \rho_w + K_g \rho_v + \mathcal{D}_{p_g}^v + \mathcal{D}_{p_g}^w \\ D_w^T &= \mathcal{D}_T^v + \mathcal{D}_T^w \\ D_w^z &= K_w \rho_w + K_g \frac{\rho_v \bar{\rho}_g}{\rho_w} \\ E_w &= {}^v Q_{w+v} - \frac{\partial \theta}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial \theta_g \rho_v}{\partial t}\end{aligned}\quad (1.75)$$

pour l'équation en pression de gaz :

$$\begin{aligned}
C_a^{p_g} &= (\theta_g + k_H \theta_l) \frac{\partial \rho_a}{\partial p_g} \\
D_a^\psi &= k_H K_w \rho_a + \mathcal{D}_\psi^a + \mathcal{D}_\psi^{aq} \\
D_a^{p_g} &= (K_g + k_H K_w) \rho_a + \mathcal{D}_{p_g}^a + \mathcal{D}_{p_g}^{aq} \\
D_a^T &= \mathcal{D}_T^a + \mathcal{D}_T^{aq} \\
D_a^z &= k_H K_w \rho_a + K_g \frac{\rho_a \bar{\rho}_g}{\rho_w} \\
E_a &= {}^v Q_{a+aq} + (1 - k_H) \rho_a \frac{\partial \theta}{\partial t} - (\theta_g + k_H \theta_l) \left(\frac{R_v}{R_a} \frac{\partial \rho_v}{\partial t} - \frac{P_g}{R_a T^2} \frac{\partial T}{\partial t} \right)
\end{aligned} \tag{1.76}$$

et pour l'équation en température¹ :

$$\begin{aligned}
C_T^T &= \left[(1 - \omega) \rho_s \frac{\partial \mathfrak{h}_s}{\partial T} + \theta_l (\rho_w \frac{\partial \mathfrak{h}_w}{\partial T} + \rho_{aq} \frac{\partial \mathfrak{h}_{aq}}{\partial T}) + \theta_g (\rho_v \frac{\partial \mathfrak{h}_v}{\partial T} + \rho_a \frac{\partial \mathfrak{h}_a}{\partial T}) \right] \\
D_T^\psi &= (\rho_w \mathfrak{h}_w + \rho_{aq} \mathfrak{h}_{aq}) K_w \\
&\quad + (\mathfrak{h}_w \mathcal{D}_\psi^w + \mathfrak{h}_{aq} \mathcal{D}_\psi^{aq} + \mathfrak{h}_v \mathcal{D}_\psi^v + \mathfrak{h}_a \mathcal{D}_\psi^a) \\
D_T^{p_g} &= (\rho_w \mathfrak{h}_w + \rho_{aq} \mathfrak{h}_{aq}) K_w + (\rho_v \mathfrak{h}_v + \rho_a \mathfrak{h}_a) K_g \\
&\quad + (\mathfrak{h}_w \mathcal{D}_{p_g}^w + \mathfrak{h}_{aq} \mathcal{D}_{p_g}^{aq} + \mathfrak{h}_v \mathcal{D}_{p_g}^v + \mathfrak{h}_a \mathcal{D}_{p_g}^a) \\
D_T^T &= \bar{\lambda} + (\mathfrak{h}_w \mathcal{D}_T^w + \mathfrak{h}_{aq} \mathcal{D}_T^{aq} + \mathfrak{h}_v \mathcal{D}_T^v + \mathfrak{h}_a \mathcal{D}_T^a) \\
D_T^z &= (\rho_w \mathfrak{h}_w + \rho_{aq} \mathfrak{h}_{aq}) K_w + (\rho_v \mathfrak{h}_v + \rho_a \mathfrak{h}_a) \frac{\bar{\rho}_g}{\rho_w} K_g \\
E_T &= {}^v Q_T + {}^v Q'_v L_v + {}^v Q'_a L_d \\
&\quad - \mathfrak{h}_w \frac{\partial(\theta_l \rho_w)}{\partial t} - \mathfrak{h}_{aq} \frac{\partial(\theta_l \rho_{aq})}{\partial t} - \mathfrak{h}_v \frac{\partial(\theta_g \rho_v)}{\partial t} - \mathfrak{h}_a \frac{\partial(\theta_g \rho_a)}{\partial t} \\
&\quad + M_v g \frac{\partial p_w}{\partial t} + \frac{RT}{p_g} \frac{\partial p_g}{\partial t}
\end{aligned} \tag{1.77}$$

où l'on a adopté les notations suivantes :

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_\psi^v &= D_g \rho_g \frac{M_v}{\bar{M}_g} \frac{1}{P_g} \frac{\partial P_v}{\partial \psi} & \mathcal{D}_\psi^a &= -\frac{M_a}{M_v} \mathcal{D}_\psi^v \\
\mathcal{D}_{p_g}^v &= -D_g \rho_g \frac{M_v}{\bar{M}_g} \frac{1}{P_g} \rho_w g \frac{P_v}{P_g} & \mathcal{D}_{p_g}^a &= -\frac{M_a}{M_v} \mathcal{D}_{p_g}^v \\
\mathcal{D}_T^v &= D_g \rho_g \frac{M_v}{\bar{M}_g} \frac{1}{P_g} \frac{\partial P_v}{\partial T} & \mathcal{D}_T^a &= -\frac{M_a}{M_v} \mathcal{D}_T^v
\end{aligned} \tag{1.78}$$

¹Rappelons que, par hypothèse, le milieu poreux est indéformable. On néglige sa dilatation thermique. Par conséquent, ρ_s est constant

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_\psi^{aq} &= k_H D_l \frac{\partial \rho_a}{\partial \psi} & \mathcal{D}_\psi^w &= -\frac{M_v}{M_a} \mathcal{D}_\psi^{aq} \\
\mathcal{D}_{p_g}^{aq} &= k_H D_l \frac{\partial \rho_a}{\partial h_g} & \mathcal{D}_{p_g}^w &= -\frac{M_v}{M_a} \mathcal{D}_{p_g}^{aq} \\
\mathcal{D}_T^{aq} &= k_H D_l \frac{\partial \rho_a}{\partial T} & \mathcal{D}_T^w &= -\frac{M_v}{M_a} \mathcal{D}_T^{aq}
\end{aligned} \tag{1.79}$$

Les termes $\frac{dp_w}{dt}$ et $\frac{dp_g}{dt}$ ne sont pas explicités dans cet exposé. On remarque que, si on autorise la dissolution de l'air dans l'eau en prenant $k_H \neq 0$, alors les coefficients $\theta_g + k_H \theta_l = \omega - (1 - k_H)\theta$ de $C_a^{p_g}$ ne sont jamais nuls. Cela est particulièrement intéressant pour la stabilité numérique de l'équation de conservation de l'air (1.74b).

1.1.2 Dégénérescence du système d'équation sans air

En l'absence du constituant air, le système à résoudre se simplifie considérablement. L'équation de conservation de l'air disparaît. Il ne reste alors plus que deux équations de conservation. On élimine donc la variable p_g qui est égale à la pression de vapeur p_v , et qui est entièrement définie par les deux autres variables ψ et T via la loi de Kelvin (1.57) :

$$dp_v = \frac{\partial p_v}{\partial T} dT + \frac{\partial p_v}{\partial \psi} d\psi \tag{1.80}$$

Le système d'équations (1.74) se réduit aux deux équations suivantes :

$$\boxed{
\begin{cases}
C_w^\psi \frac{\partial \psi}{\partial t} + \text{div}(-D_w^\psi \vec{\nabla} \psi) &= \text{div}(D_w^T \vec{\nabla} T + D_w^z \vec{\nabla} z) + E_w \\
C_T^T \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(-D_T^T \vec{\nabla} T) &= \text{div}(D_T^\psi \vec{\nabla} \psi + D_T^z \vec{\nabla} z) + E_T
\end{cases}
} \tag{1.81}$$

dont les coefficients ont les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
C_w^\psi &= \rho_w \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \\
D_w^\psi &= \rho_w K_w + (\rho_w K_w + \rho_v K_g) \frac{\partial p_v}{\partial \psi} \\
D_w^T &= (\rho_w K_w + \rho_v K_g) \frac{\partial p_v}{\partial T} \\
D_w^z &= \rho_w K_w + \frac{\rho_v^2}{\rho_w} K_g \\
E_w &= {}^v Q_{w+v} - \frac{\partial \theta}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial \theta_g \rho_v}{\partial t}
\end{aligned} \tag{1.82}$$

$$\begin{aligned} C_T^T &= \left[(1 - \omega) \rho_s \frac{\partial \mathfrak{h}_s}{\partial T} + \theta_l \rho_w \frac{\partial \mathfrak{h}_w}{\partial T} + \theta_g \rho_v \frac{\partial \mathfrak{h}_v}{\partial T} \right] \\ D_T^T &= \bar{\lambda} + \rho_w \mathfrak{h}_w K_w \frac{\partial p_v}{\partial T} + \rho_v \mathfrak{h}_v K_g \frac{\partial p_v}{\partial T} \\ D_T^\psi &= \rho_w \mathfrak{h}_w K_w \left(1 + \frac{\partial p_v}{\partial \psi} \right) + \rho_v \mathfrak{h}_v K_g \frac{\partial p_v}{\partial \psi} \\ D_T^z &= \rho_w \mathfrak{h}_w K_w + \frac{\rho_v^2}{\rho_w} \mathfrak{h}_v K_g \\ E_T &= {}^v Q_T - \mathfrak{h}_w \frac{\partial(\theta_l \rho_w)}{\partial t} - \mathfrak{h}_v \frac{\partial(\theta_g \rho_v)}{\partial t} + M_v g \frac{\partial p_w}{\partial t} + \frac{RT}{p_g} \frac{\partial p_g}{\partial t} \end{aligned} \tag{1.83}$$

Ici encore, ces coefficients varient fortement avec les inconnues du problème ψ et T , et, quoiqu'une équation ait disparu, maintiennent une forte non linéarité du système.

1.2 Modèle numérique

1.2.1 Algorithme de résolution

Le système d'équations, que ce soit (1.74) ou (1.81), est résolu en couplant les équations par point fixe [Le Potier 1999a ; Le Potier 1999b]. A chaque itération $k + 1$, les termes de convection et tous les coefficients sont calculés en fonction des valeurs des variables obtenues à l'itération précédente k (ou au pas de temps précédent si c'est la première itération). Puis les équations sont résolues par la méthode des EFMH [Le Potier et al. 1998b]. Les nouvelles valeurs des variables principales sont ainsi obtenues. Le critère de sortie du point fixe que l'on a choisi ici s'appuie sur la valeur des variables : si aucune d'entre elles n'a trop changé, on les conserve comme valeur de fin de pas de temps et on passe au pas de temps suivant, sinon, on refait une itération. C'est un critère de convergence et non de précision. On peut en fait choisir n'importe quel type de critère, et panacher. Un critère plus contraignant est de vérifier l'équation à résoudre a posteriori, avec les variables et les paramètres de l'itération $k + 1$. La convergence peut alors devenir impossible si le schéma présente un biais. En général, plus le système se rapproche de la diagonale, mieux l'algorithme de Picard converge et se prête efficacement, par exemple, à la résolution de l'équation de Richards [Benet et Mouche 1997].

Ici, les termes extra-diagonaux sont importants, et la convergence de l'algorithme n'est pas garantie. Les variations des paramètres peuvent être rapides et amples, ce qui rend le système instable, ou, à tout le moins, à convergence lente. Cette dernière dépend aussi de la rapidité des phénomènes par rapport au pas de temps choisi, de la précision des résultats recherchée, du nombre maximal d'itérations autorisé ainsi que de la satisfaction des critères numériques classiques portant sur les nombres de Fourier numériques (entre autres) associés à chaque équation [Maugis 1995]. Toutefois, elle donne de bons résultats si la convergence est accessible, au prix, parfois, d'efforts importants sur le plan algorithmique. Elle est alors en général assez rapide.

Le Potier (1999a, 1999b) a montré comment implémenter dans Cast3M un tel algorithme thermo-hydraulique à travers le cas-test de Pollock [Pollock 1986]. Ce modèle décrit les transports hydraulique et thermique dans du tuff volcanique non saturé, avec un terme source thermique en son sein, simulant un site de stockage radioactif. L'ampleur et la cinétique des processus sont significativement différents de ce que l'on peut attendre dans du sable, très perméable, où les pressions capillaires sont faibles. De plus, nous considérons ici la possibilité de saturation totale du milieu, soit initialement, soit au cours d'un processus de condensation ou de vaporisation.

La méthode itérative est une alternative classique à une résolution matricielle totalement couplée. Cette dernière présente l'avantage important d'éliminer les problèmes

de convergence liés aux fortes variations des couplages d'une variable avec l'autre. Par contre, pour deux équations couplées, la matrice à inverser est quatre fois que grande, et mal conditionnée par des termes extra-diagonaux importants lorsque le couplage est fort comme ici. De même, ce type d'inversion doit se soumettre à des itérations de non linéarité, lui aussi. Enfin, la prise en compte de termes de convection comme $\text{div}(D_T^z \vec{\nabla} z)$ reste également difficile. En résumé, la méthode matricielle à couplage total, complexe à mettre en œuvre, soulagerait une des difficultés de la résolution, mais n'apporterait pas une réponse décisive face aux difficultés principales.

1.2.2 Prise en compte de la disparition d'une phase

Bien que le modèle numérique implémenté ne prenne en compte que la disparition de la phase vapeur au profit d'une phase liquide unique, nous présentons ici une approche plus générale permettant de prendre en compte indifféremment les passages du diphasique au monophasique liquide ou vapeur. On tient d'abord compte de deux constituants eau et air, puis on répète la méthode sans ce dernier constituant.

Les systèmes (1.74) et (1.81) sont écrits en fonctions des variables principales. Le choix de ces variables n'est pas anodin car elles doivent décrire le système de façon univoque. Dans le cas à un constituant, les deux variables retenues sont la température T et la succion ψ . Dans le cas à deux constituants, la pression totale de gaz p_g s'ajoute à cette liste. L'usage de la variable ψ n'est pas sans soulever quelques interrogations puisqu'en principe, elle n'est définie qu'en milieu diphasique. L'approche du traitement du problème éventuellement dégénéré (les variables ne suffisent pas à définir l'état du système) consiste à étendre la définition de la succion en milieu saturé en eau (resp. en gaz) en lui imposant de rendre compte de façon univoque de la pression d'eau (resp. de gaz), et d'être continue lors du passage non saturé-saturé. Pour ce faire, on définit une succion étendue ψ^* à partir des pressions étendues d'eau p_w^* et de gaz p_g^* . Ces variables devant être continues lors des saturations/désaturations et valoir p_w et p_g respectivement lorsque ces pressions ont un sens.

Étendre la définition de p_g suppose d'étendre la définition des pressions partielles de ses deux constituants avec les mêmes exigences. Pour ce faire, on utilise pour p_v la loi de Kelvin (1.57) avec comme paramètres la pression capillaire à la saturation donnée, et la température. La pression d'air, elle, est toujours définie correctement : la loi de Henry (1.43) permet de définir une pression d'air virtuelle lorsque le milieu est saturé en liquide, et une masse volumique d'air aqueux virtuelle lorsque le milieu est saturé en gaz.

On prend alors :

$$p_v^* = p_v^0(T) \mathcal{H}(P_c(\theta, T), T) \quad (1.84)$$

$$p_a^* = p_a \quad \text{ou} \quad \rho_{aq} R_a T / k_H \rho_w g \quad (1.85)$$

$$p_q^* = p_a^* + p_v^* \quad (1.86)$$

$$p_w^* = p_a^* - P_c(\theta, T) \quad (1.87)$$

En milieu saturé d'eau (resp. de gaz), p_v^* (resp. p_w^*) est la pression qu'aurait la vapeur (resp. l'eau) s'il y en avait un peu à la même température. p_v^* et p_w^* sont donc les pressions aux points d'ébullition et de fusion sur l'isotherme impliquée (Fig. 1.4). Cela suppose bien entendu que ces points existent. Il faut donc que la température soit comprise entre la température du point triple (0,1 °C) et la température critique de l'eau (363 °C).

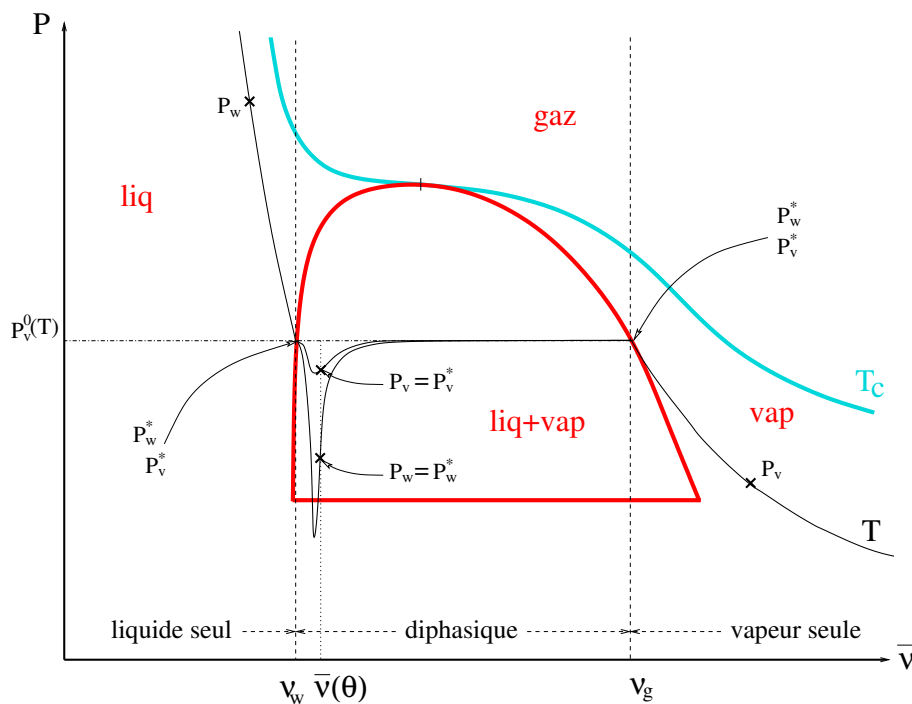


FIG. 1.4: Pressions et pressions étendues en fonction du volume molaire moyen \bar{v} dans les trois cas : liquide seul, liquide et vapeur, vapeur seule. La pression capillaire s'annule ici à saturation de vapeur.

ψ^* prend les formes suivantes suivant les phases présentes :

- En milieu non saturé avec coexistence des deux phases, θ est compris entre 0 et 1, p_g , p_w et ψ sont définies et coïncident avec les pressions étendues. Notamment, $\psi^* = \psi = p_w - p_g$. Donc $p_w = \psi^* + p_g^*$, et $p_g = p_w^* - \psi^*$.
- En milieu saturé d'eau liquide, $\theta = 1$, $p_a^* = p_{aq}/k_H$ (voir éq. (1.85)), p_w est définie et supérieure à p_w^* , mais p_g n'est pas définie. On utilise alors p_g^* dans la définition de ψ^* : $\psi^* = p_w - p_g^*$, où p_g^* a la forme $p_v^* + p_a$. On prend, à usage purement informatique et donc sous réserve de certaines précautions, $p_g = p_w^* - \psi^* < p_g^*$.

- En milieu saturé de gaz, $\theta = 0$, p_g est définie et inférieure à p_g^* , mais p_w n'est pas définie. On utilise alors p_w^* dans la définition de ψ^* : $\psi^* = p_w^* - p_g$ où p_w^* a la forme $p_a + p_v^0(T)\mathcal{H}(P_c(\theta = 0, T), T) - P_c(\theta = 0, T)$ (c'est égal à $p_a + p_v^0(T)$ si la pression capillaire est nulle à saturation en gaz). Il est impératif que $P_c(\theta = 0, T)$ soit finie. On prend, à usage purement informatique et donc sous réserve de certaines précautions $p_w = \psi^* + p_g^* > p_w^*$.

Dans tous les cas, on conserve les formes $p_w = \psi^* + p_g^*$ et $p_g = p_w^* - \psi^*$ (même s'il n'est pas toujours utile de les calculer), cela simplifie significativement l'algorithme, mais requiert certaines précautions.

Que deviennent les équations avec une phase en moins ?

On remplace ainsi dans les équations de conservation (1.74) ou (1.81) p_w par p_w^* , p_g par p_g^* et ψ par ψ^* . Théoriquement, en l'absence d'une phase, il faut éliminer tous les termes correspondant à la phase qui disparaît.

1.2.2.1 Lorsque la phase gazeuse disparaît

On a alors $K_g = D_g = \theta_g = 0$, $p_w > p_w^*$, et on utilise les valeurs étendues p_g^* et $\psi^* = p_w - p_g^*$ à la place de p_g et ψ .

L'équation de conservation de l'eau (1.74a) que l'on rappelle ici pour le cas à deux constituants :

$$C_w^\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \text{div}(-D_w^\psi \vec{\nabla} \psi^*) = \text{div}\left(D_w^{p_g} \vec{\nabla} p_g^* + D_w^T \vec{\nabla} T + D_w^z \vec{\nabla} z\right) + E_w$$

comporte dans ses coefficients (listes (1.75) ou (1.82)) des termes comme \mathcal{D}_ψ^v en P_v^* ou p_v^* . Tous les termes parasites sont nuls car $D_g = 0$. Le terme en $1/P_g^*$ ne pose pas de problème puisque P_g^* vaut au moins P_v^* qui n'est pas nul. Le premier terme $K_w \rho_w \vec{\nabla} p_g^*$ de $D_w^{p_g} \vec{\nabla} p_g^*$ – qu'il soit sous cette forme directe ou éclaté en $K_w \rho_w \frac{\partial p_g^*}{\partial \psi^*} \vec{\nabla} \psi^* + K_w \rho_w \frac{\partial p_g^*}{\partial T} \vec{\nabla} T$ – doit être conservé puisqu'il s'ajoute aux termes $K_w \rho_w \vec{\nabla} \psi^*$ (de $D_w^\psi \vec{\nabla} \psi^*$) et $K_w \rho_w \vec{\nabla} z$ (de $D_w^T \vec{\nabla} T$) pour décrire l'écoulement de l'eau $K_w \rho_w \vec{\nabla} (p_w + z)$.

L'équation de conservation de l'air (1.74b), rappelée ici pour deux constituants :

$$C_a^{p_g} \frac{\partial p_g}{\partial t} + \text{div}(-D_a^{p_g} \vec{\nabla} p_g) = \text{div}\left(D_a^\psi \vec{\nabla} \psi + D_a^T \vec{\nabla} T + D_a^z \vec{\nabla} z\right) + E_a$$

si tant est qu'on envisage sa présence dans le problème, ne dégénère pas totalement. Elle se réduit au bilan de l'air aqueux seulement, qui devient le seul mode possible de transport d'air. L'équation de conservation de l'air a alors pour variable réelle ρ_{aq} écrite indirectement par l'intermédiaire de p_g^* .

L'équation de conservation de la chaleur reprend, en les multipliant par les enthalpies massiques, les termes de transport de l'eau ou de l'air dans les différentes phases. Il n'y a donc pas de contrainte supplémentaire qui y soit liée. Par contre, il faut annuler la dérivée totale de la pression de gaz :

$$\left. \frac{dp_g^*}{dt} \right|_{\theta=1} = 0 \quad (1.88)$$

1.2.2.2 Lorsque la phase liquide disparaît

On a alors $K_l = D_l = \theta_l = 0$, $p_g = p_g^*$, et on utilise ψ^* et p_w^* .

L'usage de la forme $p_w = \psi^* + p_g^*$ n'introduit pas de termes parasites dans les équations de conservations de l'eau et de l'air. Mais il faut quand même annuler la dérivée totale de la pression d'eau de l'équation de conservation de la chaleur :

$$\left. \frac{dP_w}{dt} \right|_{\theta=0}^* = 0 \quad (1.89)$$

Remarques

1. Outre la levée de la dégénérescence que leur écriture procure, on trouve un deuxième avantage à l'usage des définitions (1.84) dans leur capacité à prévoir correctement le passage du monophasique (liquide ou vapeur) au diphasique, c'est-à-dire l'ébullition et la nucléation des premières gouttelettes d'eau. Pour l'ébullition par exemple, la succion étendue est initialement positive. Dès que la température est telle que la pression de vapeur saturante de l'eau dépasse la pression d'eau, ψ redevient négatif, ce qui correspond à l'apparition d'une fraction volumique de gaz.
2. Plusieurs conditions sont indispensables à la validité de la démarche proposée ici. Outre la nécessité que la température soit comprise entre la température du point triple et la température critique, il faut que les perméabilités relatives au gaz (resp. à l'eau) tendent vers zéro quand le milieu se sature d'eau (resp. de gaz), sans quoi, il resterait un courant de vapeur (resp. d'eau liquide) résiduel non nul. De plus, la pression capillaire ne doit pas tendre vers l'infini à désaturation totale en eau. En effet, si tel était le cas, la loi de Kelvin impose qu'alors la pression de vapeur doit s'annuler, si bien qu'il n'y a plus ni eau liquide, ni vapeur . Bien que théoriquement, la pression capillaire doit tendre vers zéro à désaturation totale, on peut indifféremment envisager les cas où elle tend vers une valeur positive finie.
3. Le calcul des dérivées de p_v , de ρ_v et de ρ_a doit tenir compte de l'extension de la loi de Kelvin aux régimes saturés, où, bien que la continuité des valeurs de P_v soit garantie, la variation en exponentielle fait place à une valeur constante. Les dérivées ci-dessus sont donc discontinues.

4. Dans le calcul présenté au chapitre 1.3 ainsi que dans le modèle numérique tel qu'il est programmé, la pression capillaire tend vers l'infini lorsque le milieu se vide de sa phase liquide. La possible transition vers une phase vapeur surchauffée seule n'a donc pas été implémentée.

1.2.3 Prise en compte de conditions aux limites de flux

Les équations (1.81) sont ni plus ni moins des équations de diffusion du type

$$C \frac{\partial X}{\partial t} + \text{div}(-D \vec{\nabla} X) = E \quad (1.90)$$

Leur modélisation numérique s'appuie sur des conditions initiales et des conditions aux limites. Ces dernières peuvent être de plusieurs types, mais on retient surtout les conditions aux limites de Dirichlet, où la valeur de la variable X est imposée, et les conditions aux limites de Neumann, où la composante normale du flux $-D \vec{\nabla} X$ est imposée.

Dans l'équation de conservation de l'eau par exemple, la variable est ψ , et le flux dont la composante normale à imposer aux frontières – si l'on désire des conditions aux limites de Neumann – est $-D_w^\psi \vec{\nabla} \psi$. Or, que ce soit pour la conservation de l'eau, de l'air ou de la chaleur, les conditions aux limites physiques portent sur le flux total le plus souvent (mais on pourrait aussi être en présence d'un dispositif qui imposerait spécifiquement un flux de vapeur, un flux convectif de liquide, un flux d'air aqueux, etc.). Pour l'eau, le cas le plus simple est celui où l'on désire imposer le flux total $Q_w^{impos} = -(D_w^\psi \vec{\nabla} \psi + D_w^{p_g} \vec{\nabla} p_g + D_w^T \vec{\nabla} T + D_w^z \vec{\nabla} z) \cdot \vec{n}$, où \vec{n} est le vecteur normal sortant de la frontière du milieu modélisé. On estime alors la composante normale du flux complémentaire $Q_w^{compl.} = -(D_w^{p_g} \vec{\nabla} p_g + D_w^T \vec{\nabla} T + D_w^z \vec{\nabla} z) \cdot \vec{n}$, ce qui donne la valeur à imposer au flux calculé $Q^{CL} = Q_w^{impos} - Q_w^{compl.}$.

Cette démarche est transposable aux autres équations, ainsi qu'aux conditions de Neumann “exotiques” où une fraction seulement du flux total est imposée.

1.2.4 Calcul des termes sources croisés

Les termes dit “convectifs” sont les termes impliquant les gradients de variables qui ne sont pas l'inconnue de l'équation en cours. Ce sont par exemple $\text{div}(D_w^{p_g} \vec{\nabla} p_g)$, $\text{div}(D_w^T \vec{\nabla} T)$ ou $\text{div}(D_w^z \vec{\nabla} z)$ pour l'équation de conservation de l'eau. Leur calcul est nécessaire pour la résolution de l'équation (où ils interviennent comme terme source) et pour l'établissement des conditions aux limites de flux.

Dans le cadre de la formulation Éléments Finis Mixte Hybride que nous utilisons [Roberts 1991 ; Dabbene 1993], et l'usage qu'en propose Le Potier (1999b), il y a plusieurs approches possibles, mais toutes reposent sur le statut de variable duale

dont jouit le flux. Ce qui suit est hautement spécifique aux EFMH, précisément en ce qu'ils donnent accès directement aux débits aux faces des éléments.

Supposons que l'on veuille calculer en explicite $U_w^T = \text{div}(D_w^T \vec{\nabla} T)$ pour résoudre l'équation de conservation de l'eau au temps $t + \Delta t$ connaissant la solution à l'instant t .

- La première méthode s'appuie sur une spécificité des EFMH qui fournissent directement les débits aux faces. Elle consiste à estimer U_w^T par règle de trois en récupérant le flux $\vec{j}_Q^T(t) = -D_T^T(t - \Delta t) \vec{\nabla} T(t)$ obtenu par la résolution au pas de temps précédent (t) de l'équation de conservation de la chaleur :

$$U_w^T = -\text{div} \left(\frac{D_w^T(t)}{D_T^T(t - \Delta t)} \vec{j}_Q^T(t) \right) \quad (1.91)$$

Cette méthode peu coûteuse n'est malheureusement pas applicable si le coefficient au dénominateur peut s'annuler. De plus, elle est imprécise car, les coefficients de diffusion étant définis aux centres des mailles, et les flux l'étant aux faces, il faut arriver à exprimer le flux $\vec{j}_Q^T(t)$ aux centres des mailles également (ou alternativement les coefficients de diffusion aux faces). Cette transformation, si elle est faite sans précaution ni développements spécifiques, induit un lissage et une perte de conservation.

- La deuxième méthode insiste sur la précision du calcul. On obtient le flux $D_w^T(t) \vec{\nabla} T(t)$ par résolution du sous-système

$$\frac{\partial T'}{\partial t} = -\text{div}(\varepsilon D_w^T \vec{\nabla} T') \quad (1.92)$$

sur un pas de temps quelconque (par exemple Δt , ou bien 1) avec comme conditions initiales pour les valeurs moyennes de T' par élément, celles de T , et des conditions aux limites de Dirichlet avec pour valeurs de T' imposées les valeurs de T sur la frontière du domaine. ε est choisi suffisamment petit (10^{-30}) pour que T varie très peu. La nature des conditions aux limites importe peu pourvu qu'elles soient cohérentes avec l'état initial, mais les conditions de Dirichlet sont les plus faciles à établir. Le flux obtenu après un seul pas de temps calculé vaut alors $\vec{j}_{T'} = -\varepsilon D_w^T \vec{\nabla} T' \simeq -\varepsilon D_w^T \vec{\nabla} T$. On obtient finalement $U_w^T = -(1/\varepsilon) \text{div} \vec{j}_{T'}$. Cette méthode est celle utilisée dans le modèle numérique.

On peut facilement comprendre cette méthode intuitivement en remarquant qu'elle est équivalente à faire une résolution avec une diffusion $D_w^T \vec{\nabla} T$ et un pas de temps $\varepsilon \Delta t$; le pas de temps étant trop faible pour que T' diffère de T .

- La troisième méthode est la limite de la deuxième lorsqu'on fait tendre ε vers zéro. On résout l'équation fictive

$$\frac{\partial T'}{\partial t} = -\text{div}(D_w^T \vec{\nabla} T') \quad (1.93)$$

en explicite sur un pas de temps $\Delta t' \rightarrow 0$, et sans terme source (ce qui est cohérent). Cela revient à rechercher les traces de température T_T vérifiant la condition de continuité [Dabbene 1995] :

$$\begin{aligned} BQ &= (BM^{-1} {}^tDIV)T - (BM^{-1} {}^tDIV)T_T \\ &= \begin{cases} 0 & \text{à l'intérieur du domaine} \\ \text{CL} & \text{sur les frontières} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.94)$$

qui s'écrit globalement :

$$(-BM^{-1} {}^tDIV + RIG_D)T_T = -(BM^{-1} {}^tDIV)T + FL_D + FL_Q \quad (1.95)$$

où :

T est la température moyenne dans l'élément, définie aux centre des mailles,

T_T est la trace de température, définie aux centre des faces,

Q est le débit aux faces du flux $D_w^T(t) \vec{\nabla} T(t)$,

B est la matrice de connectivité,

M^{-1} est la matrice hybride inverse contenant $(D_w^T)^{-1}$,

DIV est la matrice ligne de divergence,

RIG_D est la rigidité associée aux conditions aux limites de Dirichlet,

FL_D est le second membre associé aux conditions aux limites de Dirichlet,

FL_Q est le flux imposé correspondant aux conditions aux limites de Neumann.

On obtient ainsi la trace de température T_T en fonction des températures aux centres des éléments T compte tenu du coefficient D_w^T (qui intervient à travers M^{-1}). Le terme source s'obtient ensuite simplement à partir de T et de T_T :

$$U_w^T = DIV Q = (DIV M^{-1} {}^tDIV)T - (DIV M^{-1} {}^tDIV)T_T \quad (1.96)$$

Cette méthode pourrait représenter une économie de ressource par rapport à la deuxième.

- La quatrième méthode est motivée par l'observation que tout terme source (défini aux centre des éléments) est finalement traduit en flux aux faces pour établir le second membre de l'équation numérique. La seconde méthode calcule le second membre correspondant au terme $U_w^T = \text{div}(D_w^T \vec{\nabla} T)$ d'abord en calculant un flux à l'aide d'une résolution, puis en en prenant la divergence, puis en traduisant ce résultat en flux. Les deux dernières étapes sont coûteuses et peuvent peut-être être contournées. L.V. Benet (2000) propose une démarche avec une seule résolution, et sans calcul de divergence. Elle fait cependant l'hypothèse, source d'une certaine imprécision, que les traces (de T dans le cas présent) sont indépendantes du coefficient qui a servi à les calculer en combinant D_w^T à celles obtenues à l'aide de D_T^T pour obtenir le flux U_w^T .

1.2.5 Calcul a posteriori des flux

L'interprétation physique des différents échanges passe par l'analyse des flux des constituants : flux convectif de liquide, convectif et diffusif de vapeur et d'air, flux thermique, condensation, etc. Ils sont calculés en post-traitement à partir des résultats du calcul. Par exemple, le flux total d'eau est obtenu par la formule suivante :

$$\begin{aligned} \vec{j}_{tot.w}^{post} = & -(D_w^{\psi(n+1,k+1)} \vec{\nabla} \psi^{(n+1,k+1)} + D_w^{p_g(n+1,k+1)} \vec{\nabla} p_g^{(n+1,k+1)} \\ & + D_w^{T(n+1,k+1)} \vec{\nabla} T^{(n+1,k+1)} + D_w^z(n+1,k+1) \vec{\nabla} z) \end{aligned} \quad (1.97)$$

où les quatre termes sont calculés par la méthode exposée au §1.2.4. Les exposants $(n+1, k+1)$ signifient que le terme est obtenu à partir des valeurs des variables à la dernière itération $k+1$ du temps $n+1$, c'est-à-dire à l'issue du calcul du $n+1^{me}$ pas de temps.

Ce résultat est différent du flux total ayant réellement eu cours pendant le pas de temps calculé, et dont $\psi^{(n+1,k+1)}$, $p_g^{(n+1,k+1)}$ et $T^{(n+1,k+1)}$ sont issus. Le flux total effectif d'eau est en fait :

$$\begin{aligned} \vec{j}_{tot.w}^{eff.} = & -(D_w^{\psi(n+1,k)} \vec{\nabla} \psi^{(n+1,k+1)} + D_w^{p_g(n+1,k)} \vec{\nabla} p_g^{(n+1,k)} \\ & + D_w^{T(n+1,k)} \vec{\nabla} T^{(n+1,k)} + D_w^z(n+1,k) \vec{\nabla} z) \end{aligned} \quad (1.98)$$

où k est l'indice de l'avant-dernière itération. $-D_w^{\psi(n+1,k)} \vec{\nabla} \psi^{(n+1,k+1)}$ est le flux implicitement résolu, et les autres termes sont les termes croisés calculés en préparation de la dernière itération. Cette remarque est importante car même si, en principe, les écritures (1.97) et (1.98) sont équivalentes à la convergence, en pratique, cette dernière n'est jamais atteinte que partiellement. Qualitativement, ceci a pour conséquence, entre autres, qu'en présence d'une condition à la limite de flux total d'eau nul, le flux total d'eau visualisé en post-traitement serait a priori non nul, quand bien même le flux total d'eau mis en jeu dans le calcul serait effectivement nul.

La même logique est suivie pour le calcul des autres flux. Par exemple, le flux d'eau "post-traité" est :

$$\vec{j}_{conv.w}^{post} = -K_w(\psi^{(n+1,k+1)}, T^{(n+1,k+1)})(\vec{\nabla} \psi^{(n+1,k+1)} + \vec{\nabla} p_g^{(n+1,k+1)} + \vec{\nabla} z) \quad (1.99)$$

et ainsi de suite pour les autres flux.

L'intérêt de cette approche est que tous les flux sont calculés de la même façon, et sont par conséquent cumulables exactement. En particulier, le flux total d'eau estimé a posteriori $\vec{j}_{tot.w}^{post}$ est bien égal à la somme du flux total d'eau liquide $\vec{j}_w^{l,post}$ et du flux total de vapeur $\vec{j}_{tot.v}^{post}$, et n'est pas égal au flux total d'eau effectivement utilisé dans le calcul.

1.2.6 Établissement de conditions initiales

Condition de cohérence

Le système est défini entièrement par trois variables (Voir §1.1.1.1) – deux seulement s'il n'y a pas d'air. Pourtant, les conditions initiales sont basées sur quatre grandeurs : p_w , p_g (on peut remplacer l'une de ces deux grandeurs par leur différence ψ), p_a et T . Pour assurer leur compatibilité, au niveau de la pression de vapeur par exemple, Il faut qu'elles vérifient :

$$p_g - p_a = p_v^0(T) \mathcal{H}(\psi, T) \quad (1.100)$$

Cette équation peut être résolue, soit en se donnant ψ , p_g et T et en en déduisant p_a (qui peut être négatif!); soit en imposant ψ , p_g et p_a et en en déduisant T (ce qui peut amener quelques surprises, surtout si l'on prend $p_g = p_a$ car alors $T = 0$ °C); soit en imposant ψ , p_a et T et en en déduisant p_g ; soit, enfin, en imposant p_w , p_a , T et en en déduisant ψ (ou p_g). Les deux dernières possibilités sont les plus intéressantes pour le type de problème abordé. Le choix de la dernière s'impose lorsqu'on inclut une condition d'isostaticité.

Condition d'isostaticité

On peut de plus faire l'hypothèse que l'état initial correspond à un état d'équilibre non perturbé (c'est à dire soumis à aucune sollicitation). Ceci impose que : (i) les conditions aux limites soient compatibles avec les conditions initiales. On intègre cette contrainte en choisissant les conditions initiales telles qu'elles vérifient déjà les conditions aux limites de Dirichlet; (ii) il ne doit pas y avoir d'écoulement initial, ni d'eau, ni de gaz, ni de chaleur. La première contrainte stipule que la charge d'eau est constante partout, la seconde que la charge de gaz est constante partout, et la troisième que le milieu est initialement isotherme (à la température donnée par la condition aux limites thermique). Les deux dernières sont aisément réalisées, et la première impose la relation suivante :

$$p_w + z = \text{cste} \quad (1.101)$$

la constante étant calculée en un point où p_w est déterminable par le problème physique (par exemple en haut de la frontière libre aval). C'est en particulier cette constante qui définit le niveau de saturation global du système.

Muni de cette deuxième condition, le système n'est plus défini initialement que par deux variables : T et p_a (nulle en l'absence d'air), et la valeur de p_w en un point.

1.3 Application à la maquette MASCILIA

Nous présentons ici l'application du modèle physique et numérique détaillé dans les deux premières parties à des situations nominales de fonctionnement de la maquette MASCILIA. Les calculs sont à deux ou à trois dimensions.

1.3.1 Principe de la maquette

La maquette MASCILIA est une cuve de sable confinée par des parois métalliques et pourvue d'un corps chauffant en son sein. Sa longueur est de 3 mètres, et sa section carrée fait 2 mètres de côté. Ces quatre côtés sont imperméables tandis que la face amont est susceptible d'être alimentée en eau par une pompe, et la face aval est en contact avec un bac d'eau dont la hauteur est contrôlée. L'ensemble est maintenu à une même température imposée. Le sable étant initialement saturé d'eau, on s'attend à ce qu'une bulle de vapeur se forme autour du corps chauffant, chasse l'eau vers l'aval, monte sous l'effet de la pression d'Archimède et soit déformée par le flux éventuel d'eau venant de l'amont. La maquette doit permettre de valider les outils de modélisation sur ce cas expérimentalement tractable, afin de transposer leur application à la prédiction du comportement d'un site d'entreposage en sub-surface.

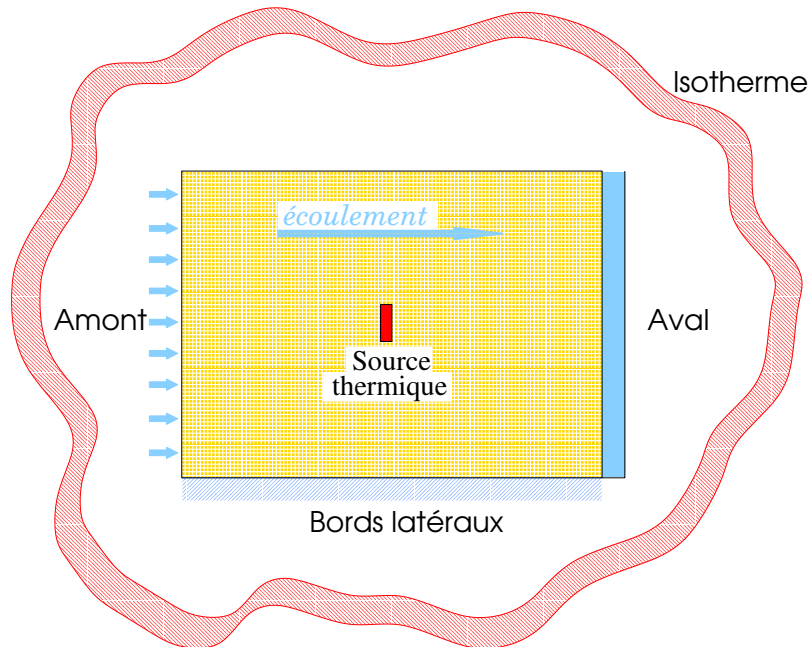


FIG. 1.5: Schéma de principe de la maquette MASCILIA (coupe 2D).

Les conditions nominales de fonctionnement sont 100 litres d'eau par heure en amont, une source thermique de 1000 W, et une température externe imposée de 80°C. Le niveau d'eau du bac aval coïncide avec le point le plus haut de la cuve intérieure (Fig. 1.5).

1.3.2 Données physiques et numériques, maillage

1.3.2.1 Données physiques

Rappelons un certain nombre d'hypothèses spécifiques à la modélisation actuelle du comportement de la maquette MASCILIA :

- il n'y a pas d'air, ni gazeux, ni dissout, donc pas de pression osmotique ni de diffusion moléculaire,
- la seule forme d'alimentation en eau est liquide,
- la vapeur est un gaz parfait,
- la pression capillaire ne varie pas avec la température,
- le corps chauffant ne fait pas obstacle à l'écoulement (il est supposé perméable).

La plupart des données qui suivent proviennent de [Schmidt et Grigull 1989 ; Volckaert et al. 1996a].

Viscosités dynamiques La viscosité dynamique de l'eau est [Volckaert et al. 1996a , p365] :

$$\mu_w = A(T - T_0)^n$$

avec $A = 0,6612 \text{ kg/ms}$; $T_0 = 229 \text{ K}$; $n = -1,562$.

Pour obtenir celle du gaz, on donne dans un soucis de généralité la loi du mélange air sec - vapeur, quitte à n'en utiliser qu'une forme simplifiée pour la vapeur seule. Cette loi s'exprime à partir des viscosités dynamiques des constituants purs [Volckaert et al. 1996a , p411] :

$$\mu_a = \mu_a^0 \exp \left[A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \right] \quad (1.102)$$

avec $\mu_a^0 = 1,82 \cdot 10^{-5} \text{ kg/ms}$; $A = 0,63404$; $B = -45,638 \text{ K}$; $C = 380,87 \text{ K}^2$; $D = -3,4505$; et

$$\mu_v = \mu_v^0 + A(T - T_0) \quad (1.103)$$

avec $\mu_v^0 = 1,254 \cdot 10^{-5} \text{ kg/ms}$; $A = 3,711 \cdot 10^{-8}$ et $T_0 = 373 \text{ K}$.

La viscosité dynamique du mélange gazeux est alors [Volckaert et al. 1996a , p412] :

$$\begin{aligned} \mu_g = & \mu_a * \left(1 + \frac{(x_v/x_a)[1 + (\mu_a/\mu_v)^{1/2}(M_v/M_a)^{1/4}]^2}{(2\sqrt{2})[1 + (M_a/M_v)]^{1/2}} \right)^{-1} \\ & + \mu_v * \left(1 + \frac{(x_a/x_v)[1 + (\mu_v/\mu_a)^{1/2}(M_a/M_v)^{1/4}]^2}{(2\sqrt{2})[1 + (M_v/M_a)]^{1/2}} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (1.104)$$

Au final, la viscosité dynamique de la phase liquide est de l'ordre de 10^{-3} kg m/s et celle du gaz de l'ordre de 10^{-5} kg m/s

Perméabilités relatives On admet ici l'existence d'une teneur en eau résiduelle $\theta_r = 6\%$ et on définit la saturation réduite :

$$S^* = \frac{S_l - S_r}{1 - S_r} \quad (1.105)$$

qui varie entre 0 et 1. S_r est la saturation résiduelle θ_r/ω .

On utilise pour le gaz la loi de perméabilité relative du sable Del Monte donnée par Liakopoulos, citée par Dangla (1996) :

$$k_g^r = (1 - S^*)^2 (1 - S^{*5/3}) \quad (1.106)$$

Par contre, la loi donnée par Liakopoulos pour la perméabilité relative à l'eau n'est valable que pour les hautes saturations ($S > 0,9$) et donne des valeurs négatives aux faibles saturations. Elle ne convient à l'évidence pas à notre problème. On utilise alors une loi de perméabilité relative à l'eau d'un autre sable [Vauclin *et al* 1979] modifiée de telle façon qu'on retrouve la valeur donnée par [Dangla *et Coussy* 1996] à saturation en eau à température ambiante :

$$k_l^r = \frac{A_1 e^{b_1 \theta} + A_2 e^{b_2 \theta}}{A_1 e^{b_1 \omega} + A_2 e^{b_2 \omega}} \quad (1.107)$$

avec $A_1 = 1,3983 \cdot 10^{-9}$; $A_2 = 2,3032 \cdot 10^{-2}$; $b_1 = 29,781$; $b_2 = 5,6593$.

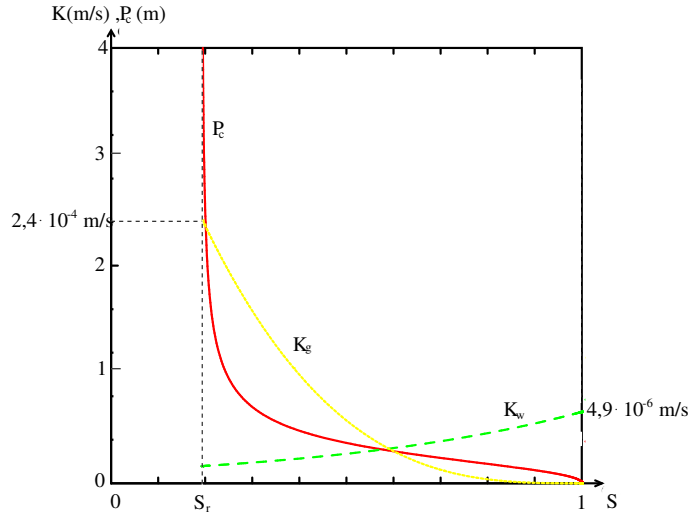


FIG. 1.6: Perméabilités relatives et loi capillaire du sable.

Remarquons que la perméabilité à l'eau ne tend pas vers zéro à saturation résiduelle, contrairement à ce à qu'on pourrait théoriquement attendre (Fig. 1.6).

Loi capillaire La loi capillaire choisie est de type Van Genuchten. Elle est tirée elle aussi de [Vauclin *et al* 1979] :

$$\psi = -\gamma \left[\alpha \left(\frac{1}{S^*} - 1 \right) \right]^{1/\beta} \quad (1.108)$$

avec $\alpha = 1608,92$; $\beta = 2,1773$; $\gamma = 0,01$ mètre d'eau. On interdit ainsi au système de dégénérer en vapeur surchauffée en acceptant une pression capillaire tendant vers l'infini à l'approche de la saturation résiduelle.

Conductivités thermiques La conductivité thermique globale du milieu poreux, dont on suppose que toutes les phases sont localement à la même température, varie avec la saturation. A l'instar de Pollock, on choisit une combinaison arithmétique des conductivités à saturation en gaz et à saturation en liquide [Pollock 1986] :

$$\bar{\lambda} = S_g \bar{\lambda}(\theta = 0) + S_l \bar{\lambda}(\theta = 1) \quad (1.109)$$

avec $\bar{\lambda}(\theta = 0) = 0,5 W/m K$ et $\bar{\lambda}(\theta = 1) = 2 W/m K$.

Nota : Plusieurs modèles existent. On aurait pu tout aussi bien utiliser une loi géométrique ou harmonique, ou même utiliser des lois plus élaborées [Azizi 1988]. Le calage de courbes expérimentales sur le matériau utilisé constitue *in fine* l'approche la plus raisonnable au vu de l'étroite dépendance de la loi de variation de la conductivité avec la structure du milieu et la faible difficulté d'obtention de ces valeurs à l'échelle considérée. A l'échelle d'un massif de milieu naturel, par contre, une approche d'homogénéisation sera probablement nécessaire.

Données constitutives diverses

L'accélération de la pesanteur g vaut $9,81 m/s^2$.

La masse volumique de l'eau est constante égale à $998 kg/m^3$.

La masse volumique du solide $\rho_s = 1700 kg/m^3$ [Dangla et Coussy 1996].

La porosité vaut $\omega = 31,2\%$ [Vauchlin et al 1979].

La perméabilité intrinsèque vaut $k = 4,4 \cdot 10^{-13} m^2$ [Dangla et Coussy 1996].

Masses molaire de l'eau $M_v = M_w = 18 g/mol$ (de l'air $M_a = 29 g/mol$).

Constante des gaz parfaits $R = 8,314 J/mol K$.

Chaleur latente de vaporisation à $T = T_0$: $L_v(T_0) = 2,5 \cdot 10^6 J/kg = L_v = cste$.

Capacités calorifiques massiques de l'eau $c_w = 4184 J/kg K$, de la vapeur $c_v = 1900 J/kg K$, des grains de sable $c_s = 837 J/kg K$ (de l'air gazeux $c_a = 1900 J/kg K$).

Pression de vapeur saturante (d'après [Dabbene 1998]) :

$$P_v^0(T) = 10^5 (a_0 + a_1 T' + a_2 T'^2 + a_3 T'^3 + a_4 T'^4) \quad (1.110)$$

où $T' = T - T_0$ avec, en U.S.I., $a_0 = -4512,70756$; $a_1 = 1748,383$; $a_2 = 0,277768$; $a_3 = 0,275 \cdot 10^{-3}$; $a_4 = 4245585,9$.

Les données suivantes ne sont utiles qu'en présence d'air :

La tortuosité τ est prise égale à $0,5$ [Pollock 1986].

La diffusivité moléculaire en milieu infini d'eau suit la loi [Pollock 1986] :

$$d_0 = D_{atm} \frac{T^{2,3}}{P_g} \quad (1.111)$$

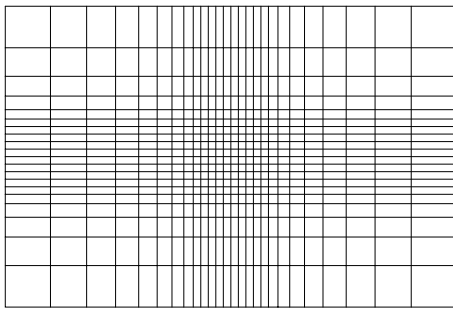
où $D_{atm} = 5,9 \cdot 10^{-6}$ U.S.I., T étant exprimé en Kelvin et P_g en Pascal.

Paramètres expérimentaux Les données suivantes ont été utilisées :

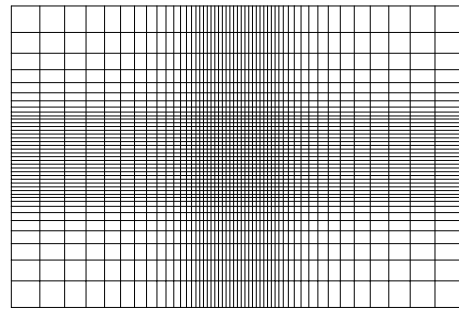
- une puissance du mandrin chauffant de 1000 Watt,
- un flux total d'eau rentrant en amont ayant pour valeurs 0, 10 l/h et 100 l/h respectivement,
- une température de maintien isotherme de 80 °C.

1.3.2.2 Paramètres numériques

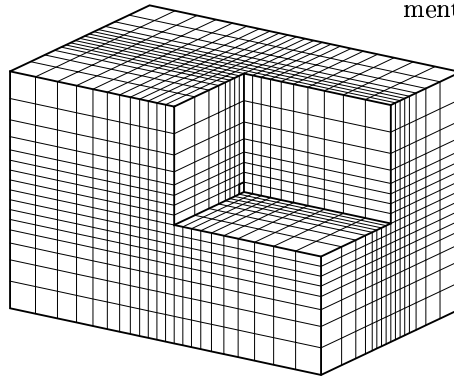
Les résolutions sont effectuées en implicite. Le pas de temps et la finesse des maillages sont choisis empiriquement de façon à trouver un compromis entre stabilité, précision, et coût de calcul. La maquette MASCILIA a d'abord été modélisée en deux dimensions, dans sa coupe centrale longitudinale verticale, puis en trois dimensions.



(a) Maillage 2D grossier (520 éléments)



(b) Maillage 2D plus fin (2000 éléments)



(c) Maillage 3D (5632 éléments)

FIG. 1.7: Maillages utilisés dans les modélisations 2D et 3D de MASCILIA

C'est sur le maillage 2D qu'a été effectuée une courte analyse de sensibilité à la finesse du maillage. Le maillage grossier possède 520 éléments, alors que le maillage plus fin en comporte 2000 (Fig. 1.7a et 1.7b). Il est apparu que les résultats étaient quantitativement très proches, du point de vue de la saturation, qui est le phénomène qui rend compte de la formation et de l'évolution de la bulle de vapeur. C'est pourquoi le maillage 3D a été bâti à partir du maillage 2D grossier. Il est

constitué de 5632 éléments (Fig. 1.7c).

Le choix du pas de temps est, comme d'habitude, problématique pour ce système où les processus ont des dynamiques contrastées. Le temps caractéristique de l'effet caloduc, qui met en jeu de forts gradients de succion et une grande perméabilité au gaz, est de quelques secondes pour quelques décimètres. A la même échelle, la conduction thermique et la diffusion hydraulique se déploient avec des cinétiques de l'ordre de l'heure ou de la journée. Nous avons choisi un pas de temps intermédiaire de 15 minutes, pour lequel on s'attend à une imprécision sur le transitoire caloduc, et de la diffusion numérique significative pour les conductions thermique et hydraulique saturée.

1.3.3 Résultats et commentaires

Les calculs qui suivent démontrent la capacité du code à modéliser les phénomènes diphasiques dans le cadre de la maquette MASCILIA. Ils n'ont pas pour but de fournir des résultats quantitatifs utilisables en vue d'un dimensionnement, mais simplement des éléments de compréhension et de démonstration. On cherche en particulier à observer l'ensemble des comportements physiques attendus : flottabilité, effet caloduc, convection forcée, vaporisation, etc.

Le flux d'entrée d'eau peut atteindre 2000 l/h , mais les calculs n'ont pas dépassé 100 l/h parce que la convection forcée est alors déjà le phénomène dominant, et l'eau n'a pas le temps de se vaporiser à la puissance considérée. Les calculs ne présentent alors plus d'intérêt qualitatif.

On présente les résultats des calculs 2D (maillage fin) et 3D (maillage grossier) pour trois débits d'entrée différents : 0, 10 et 100 l/h . En 2D, les débits s'entendent par unité d'épaisseur du dispositif. Le pas de temps est de 900 secondes. Il y a entre 200 et 500 pas de temps par calcul, ce qui représente entre 3 et 10 heures de temps CPU d'un processeur d'un IBM SP2 (30 secondes par itération en 2D, 2 minutes en 3D).

On ne présente qu'une sélection de résultats de calcul aux fins d'illustration. Le post-traitement complet est présenté dans [Maugis et Le Potier 1999]. L'effet caloduc est démontré sans débit d'entrée et se retrouve dans les autres situations où la bulle de vapeur a le temps de se former. Les figures de diffusion thermique diffèrent un peu suivant la dimensionnalité et l'intensité du flux imposé en entrée, mais l'impact sur le comportement global du système est faible, et les observations physiques sont inchangées.

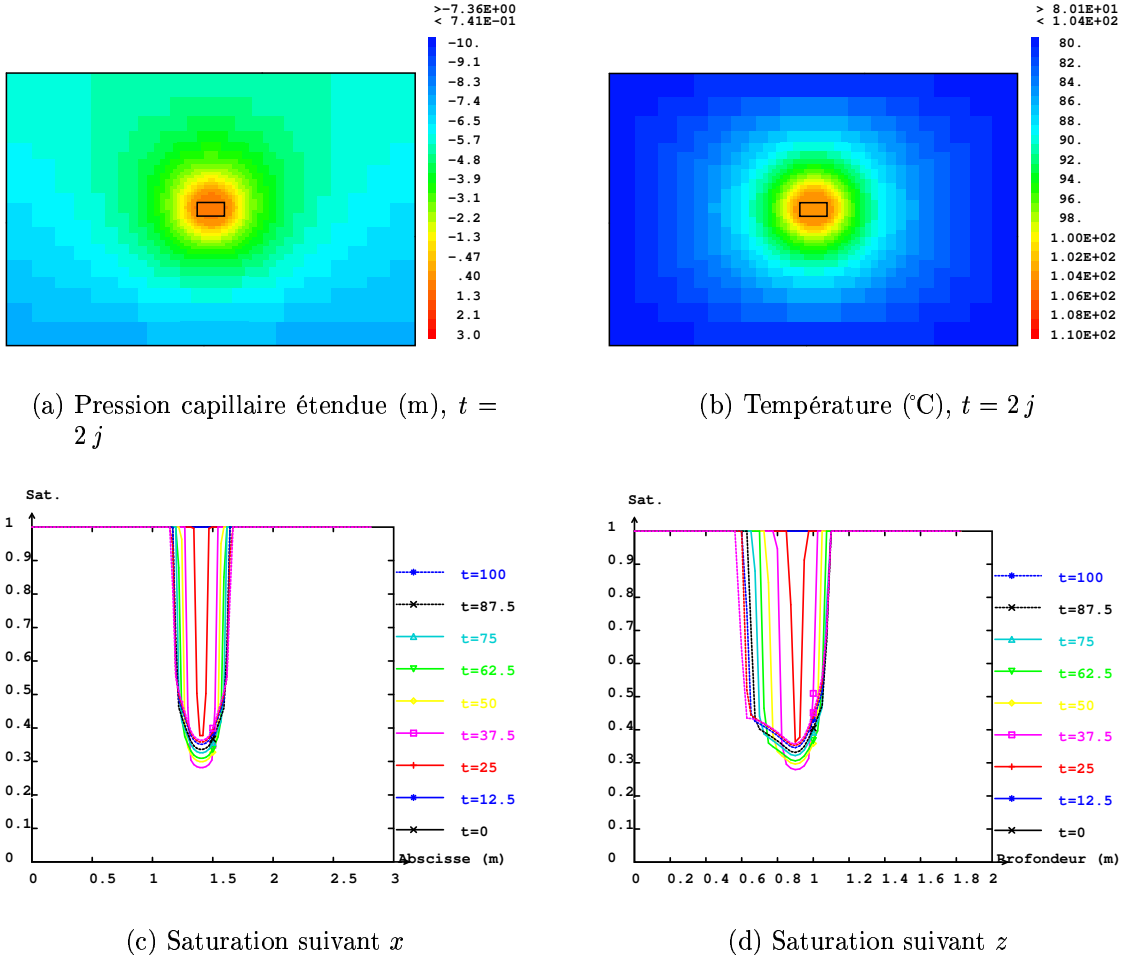


FIG. 1.8: Variables principales et saturation sans flux d'entrée pour un modèle 2D vertical. Dans les deux courbes du bas, le temps est donnée en heures.

Interprétation

On retrouve une grande partie des phénomènes physiques auxquels on s'attendait. Notons que l'on parle de bulle de vapeur, mais qu'en fait il s'agit d'une simple zone diphasique en milieu poreux, où l'eau liquide reste présente partout.

Mise en évidence de l'apparition de la bulle de vapeur La bulle de vapeur apparaît (Fig. 1.9c) dès que la pression capillaire étendue passe au-dessus de zéro. Ce passage est continu. En grandissant, la bulle chasse l'eau liquide vers l'aval en un flux qui vient s'ajouter au courant forcé (Fig. 1.9a).

Mise en évidence des convections naturelle et forcée La bulle est de forme à peu près sphérique, mais elle est déformée par la convection naturelle d'une part et la poussée exercée par la convection forcée d'eau d'autre part. Le premier effet est bien visible sur la figure 1.9d où l'on voit la vapeur monter sous l'effet de la pression

d'Archimède. Le second effet résulte de la surpression d'eau (et donc de pression capillaire) provenant de la poussée de l'eau au voisinage de l'alimentation amont, très net sur les figures 1.9. Ce dernier effet reste modéré pour un débit d'entrée de 10 l/h . Lorsqu'il atteint 100 l/h , la température n'a pas le temps de croître suffisamment pour initier une vaporisation.

Influence de la bulle sur l'écoulement Du fait de sa faible perméabilité, la bulle de vapeur fait obstacle à l'écoulement d'eau liquide (Fig. 1.9b); mais celle-ci circule encore via la fraction résiduelle. La convection forcée a moins d'impact en 3 dimensions qu'en deux dimensions parce que l'espace est mieux connecté. Ainsi, la bulle fait nettement plus barrage au courant d'eau en deux dimensions (Fig. 1.8b) qu'en trois (non représenté).

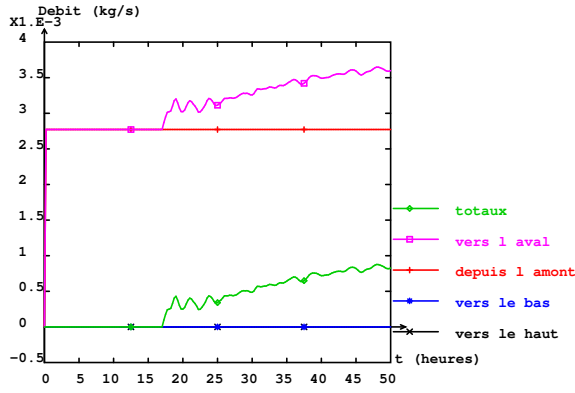
Évolution de la température En ce qui concerne le champ de température, il est moins perturbé par un faible courant d'eau que la pression capillaire. Il est en fait peu sensible à la forme de la bulle bien que la conductivité thermique varie d'un facteur 4 entre le milieu saturé et le milieu à saturation irréductible. Même pour le faible courant de 10 l/h , la température est plus transportée par convection que par conduction (le Peclet thermique est supérieur à 1) ainsi que l'illustrent les figures 1.9e et 1.9c. Enfin, bien que cela ne soit pas très net sur la figure 1.8b, le maximum de température se situe légèrement en dessous de la source. Ceci s'explique par la dilution de la chaleur lorsque la vapeur monte et explore un volume plus grand en haut qu'en bas, du fait de la convection naturelle.

Il est très important de rappeler ici deux choses. D'une part l'impossibilité d'obtenir une zone asséchée du fait de la forme de la loi capillaire (qui tend vers l'infini aux faibles saturations). D'autre part, la perméabilité à l'eau ne tend pas vers 0 aux saturations minimales, ce qui n'est guère réaliste. Il en résulte que le transfert de chaleur au niveau de la source n'est jamais purement conductif. Les températures maximales observées au centre de la source s'en trouvent grandement limitées et devraient, en tout état de cause, être beaucoup plus élevées.

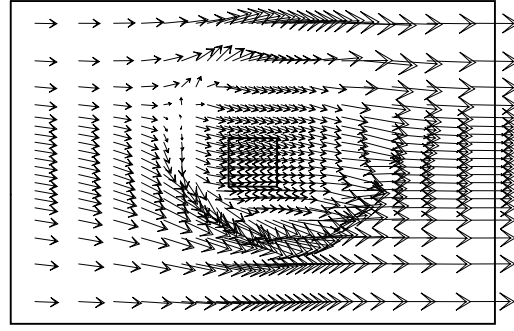
Installation du régime permanent Que ce soit en 2D (Fig. 1.10) comme en 3D, le régime permanent s'installe dans la source après un peu moins d'une journée. La bulle s'étend alors lentement (Fig. 1.8c), mais la température met beaucoup plus de temps à se stabiliser dans l'ensemble du domaine. Il lui faut plus de cinq jours, quoiqu'elle varie alors peu. Les simulations n'ont pas été menées à des temps ultérieurs.

Mise en évidence de l'effet caloduc Les échanges qui ont lieu au sein de la bulle évoquent l'effet caloduc, aux différences près que l'interface eau-vapeur se déplace. La figure 1.11 rassemble les éléments permettant de le constater :

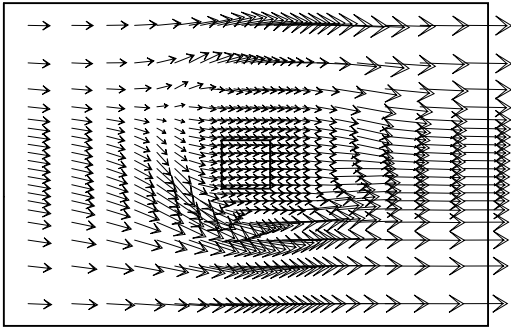
La vapeur se déplace de façon centrifuge (Fig. 1.11d), se condense en début du front de saturation (Fig. 1.11b), libérant ainsi sa chaleur latente. Un courant d'eau en



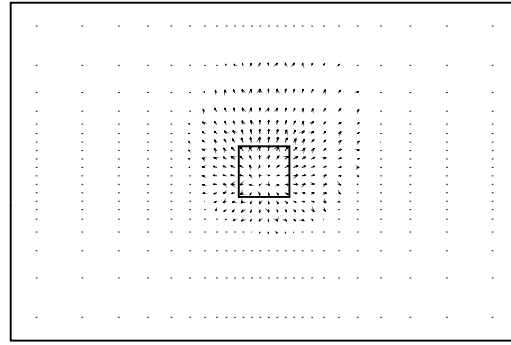
(a) Débit total d'eau aux différents bords



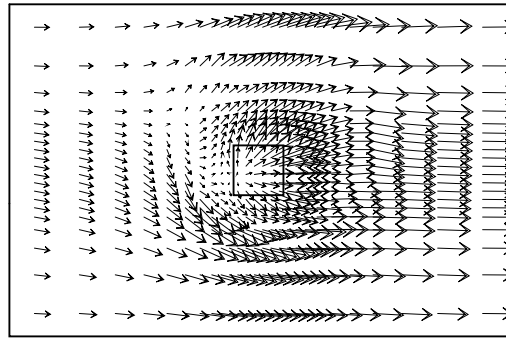
(b) Densité de flux d'eau liquide



(c) Densité de flux total d'eau



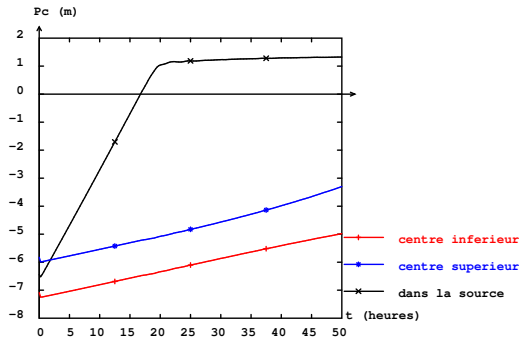
(d) Densité de flux de vapeur



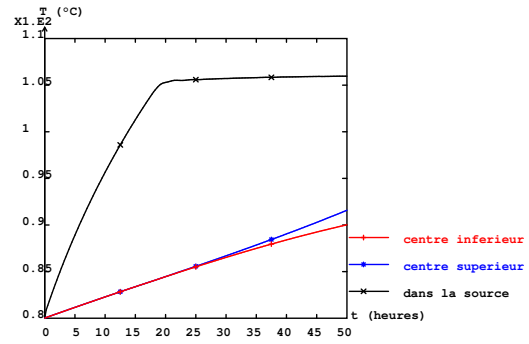
(e) Flux de chaleur

FIG. 1.9: Flux d'eau et de chaleur en fonction du temps et de l'espace (à $t = 1 j$) pour un modèle 2D vertical avec un flux d'entrée de $10 l/h$.

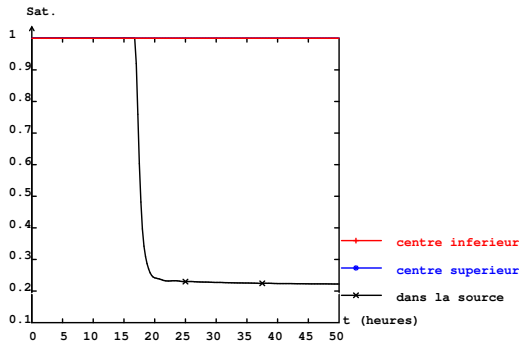
provenance des zones saturées s'achemine vers la source (Fig. 1.11c) en contrepartie de l'eau qui s'est vaporisée, par succion plutôt que par gravité, car la loi de pression capillaire interdit de descendre en dessous de la saturation irréductible. Ces deux courants forment une boucle où la saturation est presque constante égale à la saturation irréductible (Fig. 1.11a). Le flux total d'eau y est donc nul (Fig. 1.11e)



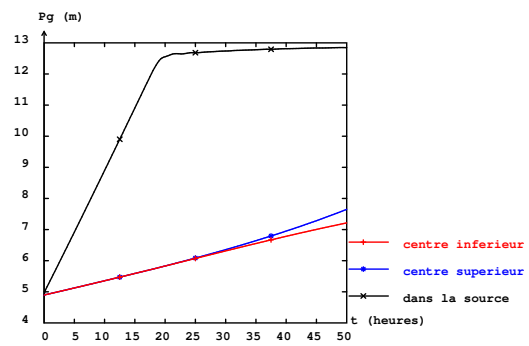
(a) Pression capillaire étendue (m)



(b) Température (°C)



(c) Saturation



(d) Pression de vapeur (m)

FIG. 1.10: Évolutions au cours du temps. Flux d'entrée = 10 l/h

– mais la chaleur latente de fusion n'en est pas moins transportée vers le front de saturation (Fig. 1.11f).

La température n'est pas constante pour autant au sein de la bulle car les transferts de chaleur (notamment par convection) ne sont pas instantanés.

Instabilité aux fortes arrivées d'eau Lorsque les flux d'eau rentrants sont très élevés (100 l/h suffisent), si élevés d'ailleurs qu'il n'y a plus de vaporisation, on observe des oscillations non physiques de température dans le cas 2D, mais pas en 3D. En amont, celle-ci devient inférieure de quelques degrés à la température initiale. Cette infraction au principe de conservation du maximum est connue avec les EFMH (Cf. chapitre 5). Il apparaît nécessaire dans ce cas-là d'utiliser un schéma décentré pour la convection de l'eau ou d'avoir recours à d'autres expédients numériques (en condensant la matrice par exemple : technique du "Mass Lumping").

Soulignons néanmoins qu'en l'absence de vaporisation, l'usage d'une modélisation multiphasique perd nettement de son intérêt.

Résultats obtenus par d'autres équipes

L'exercice MASCILIA comportait également la participation d'une autre équipe de modélisation de la Direction de l'Énergie Nucléaire. Didier Jamet (DTP/SMTH/LDTA) a utilisé le code MC3D-REPO pour conduire les simulations [Castelier et al 2002]. C'est une mouture spécifique du logiciel MC3D, qui est dédié à l'étude d'écoulements polyphasiques, essentiellement dans le cadre d'études d'accidents graves de réacteurs nucléaires, et dont le développement est externalisé. Les équations résolues sont globalement les mêmes que celles que j'ai présentées, avec toutefois les différences suivantes :

- la matrice poreuse peut être déformable, et l'eau liquide compressible,
- l'écriture en bilan de masse des phases est préférée à la nôtre en bilan de masse des constituants. Une équation de bilan de volume des phases a donc été ajoutée,
- deux équations de bilan de quantité de mouvement des phases liquide et vapeur s'ajoutent aux autres. Elle requièrent la connaissance des passabilités des phases, mais permettent de s'abstraire de la loi de Darcy et de son hypothèse d'écoulements lents,
- le bilan d'énergie est écrit en énergie interne plutôt qu'en enthalpie. Les termes d'énergie mécanique $-P_j d\theta_j$ sont pris en compte, contrairement à nos termes duaux $-\theta_j dP_j$ que l'on a négligés,
- les perméabilités hydrauliques relatives s'annulent lors de la désaturation totale de leurs phases respectives,
- la loi capillaire est tronquée aux fortes comme aux faibles saturations. Une conséquence importante est la faculté de générer une phase de vapeur seule.

D'un point de vue numérique, on peut citer les différences les plus importantes par rapport à notre approche :

- l'équilibre liquide-vapeur, tel que la loi de Kelvin l'incarne, est relaxé par une cinétique de vaporisation d'ordre 1 fonction de l'écart entre la pression de vapeur courante et la pression de vapeur que l'on devrait avoir à l'équilibre. Le taux de relaxation est un artifice numérique dont la valeur est ajustée de façon à obtenir une bonne précision,
- les variables sont discrétisées spatialement par des Volumes Finis, avec des flux aux faces, sur maillage cartésien obligatoirement,
- la discrétisation temporelle est mixte explicite/implicite selon les termes, ce qui amène en particulier des contraintes drastiques sur le pas de temps qui peut atteindre 0,01 s. Un calcul dure alors une à deux semaines, alors que les nôtres ont été volontairement limités à une nuit.
- les non-linéarités sont prises en compte par un algorithme de Newton, qui converge plus vite que celui de Picard, mais qui est moins stable et qui demande plus d'efforts de programmation.

Il apparaît clairement que ce logiciel est le fruit d'importants développements numériques dédiés. Conçu pour des problèmes multiphasiques et multi-constituants, il est

plus réaliste d'un point de vue physique, et plus général dans son implémentation numérique. Il permet en particulier de traiter l'apparition d'une phase de vapeur surchauffée autour de la résistance chauffante centrale. C'est la seule différence qualitative notable pour ce qui est des résultats numériques. Par contre, l'usage de volumes finis qui autorise de très petits pas de temps, et une résolution en explicite, associés à la disponibilité de moyens de calcul importants, limite considérablement la diffusion numérique dont ont été victimes nos calculs. Les résultats de MC3D-REPO sont ainsi en bien meilleur accord avec les résultats expérimentaux, sans toutefois reproduire parfaitement l'extension dissymétrique de la bulle de vapeur.

1.3.4 Comparaison expérimentale

À la suite du travail que nous avons décrit a été construite la maquette. Bien que les propriétés nominales du milieu n'aient pas été modifiées en fonction du résultat des caractérisations expérimentales préliminaires, il est tout de même intéressant de comparer la forme des résultats numériques avec celle des résultats expérimentaux (Figure 1.12).

Les températures observées sont conformes à ce que l'on pouvait attendre. Le palier, 102° C environ, correspond à une zone de coexistence d'eau liquide et de vapeur, où les échanges thermiques rapides assurés par l'effet caloduc maintiennent une bonne homogénéité. La légère surpression de l'eau en aval est à l'origine du dépassement des 100° C correspondant à l'équilibre diphasique à 1 atm. Cette "bulle" est symétrique horizontalement, et fortement déformée vers le haut du fait de la flottabilité de la vapeur chaude. Les capteurs donnent toutefois des mesures incohérentes à quelques degrés près, mais leur mise en service et leur calibration se sont révélées délicates car ils n'étaient pas totalement adaptés.

Les calculs donnent également un palier, vers 107°C. Il doit être d'autant plus marqué que la perméabilité à l'eau liquide est élevée et permet une alimentation de l'effet caloduc par retour de l'eau, aspirée par capillarité vers la source de chaleur. Les simulations donnent un palier peu marqué parce que K_w est trop faible d'un facteur 5. La hauteur de ce palier dépend de la capacité du milieu saturé à évacuer la chaleur apportée à l'interface de la bulle par la vapeur, c'est à dire essentiellement de la conductivité thermique en saturé, qui était sous-estimée d'environ 20 % .

La forme des profils de température en dehors des paliers n'est pas satisfaisante. D'une part, la symétrie horizontale de la bulle n'est pas respectée, sans doute parce que le maillage était plus fin transversalement que longitudinalement. Par contre, la bulle simulée est presque symétrique verticalement, dénotant ainsi une influence très insuffisante de la flottabilité de vapeur. D'autre part, les pentes des profils simulés sont toujours plus faibles que celles expérimentales. Ces différentes observations suggèrent une modélisation excessivement diffusive. Le maillage étant trop grossier, eu égard à la précision requise pour une bonne restitution des processus, car nous étions en limite de capacité de calcul du super-calculateur, on peut incriminer la diffusion numérique. La valeur de la conductivité thermique en non saturé était

également surestimée d'un facteur 2.

Il est regrettable que nous n'ayons pas pu poursuivre les calculs avec un maillage affiné et de meilleures estimations des paramètres physiques, faute de temps et de moyens. Il reste que la méthode itérative proposée a l'inconvénient de ne pas assurer exactement les lois physiques ni les conditions aux limites de flux à cause des différences d'itérations auxquelles sont estimées les variables.

Conclusion

La preuve de la faisabilité de calculs liés aux phénomènes physiques thermo-hydrauliques est ici apportée. On est désormais capable de modéliser l'écoulement couplé d'eau, de vapeur et de chaleur dans du sable, sous un certain nombre d'hypothèses. Les résultats rendent correctement compte de la physique des phénomènes : la bulle de vapeur apparaît correctement et se déforme sous l'action des convections naturelle et forcée. L'importance critique de la vaporisation et de la condensation apparaît à travers un effet caloduc que la modélisation met en évidence.

Les informations recueillies dans ces premiers calculs pilotes sont plutôt d'ordre qualitatif. Elles sont étroitement liées aux conditions nominales de fonctionnement. La puissance thermique a un rôle moteur dans l'installation des phénomènes.

Pour la puissance d'un kilowatt qui a été choisie, on sait à présent qu'un régime permanent n'apparaît pas avant quelques jours ; si tant est qu'un régime permanent existe.

La dimension de la "bulle" est inférieure au mètre.

Les températures maximales mesurées – compte tenu de la discrétisation spatiale – sont de 110 °C, mais la modestie de cette élévation de température est une conséquence directe de i) la possibilité qui a été laissée à l'eau de circuler dans la bulle à très faible saturation (l'effet caloduc est donc alimenté jusqu'au cœur de la source au lieu d'être strictement limité au front de vaporisation), ii) l'impossibilité de passer à une phase vapeur surchauffée seule de faible conductivité thermique.

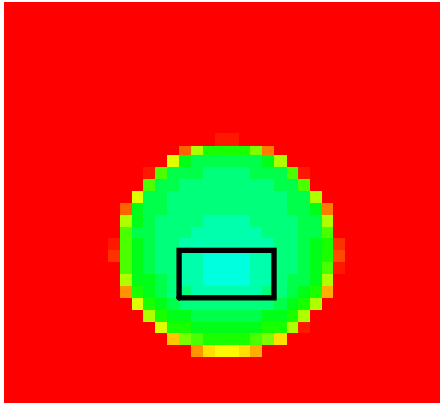
Dès un débit amont de 100l/h, la chaleur est entraînée tellement vite vers l'aval que la bulle de vapeur n'a plus le temps de se former et le milieu reste saturé.

Le dimensionnement proprement dit requiert un grand nombre de calculs dans des conditions différentes afin de faire des analyses de sensibilité. La puissance thermique de la source et le débit d'entrée sont les deux paramètres principaux. On peut aussi y inclure la taille de la source, si l'on s'intéresse au comportement de la maquette en son voisinage, ainsi que les lois de comportement que l'on ne connaît pas encore, par exemple les perméabilités relatives, la loi de saturation, la loi de variation de la conductivité thermique, etc. L'attention doit être portée sur la perméabilité à l'eau aux faibles saturations, qui contrôle l'efficacité de l'effet caloduc.

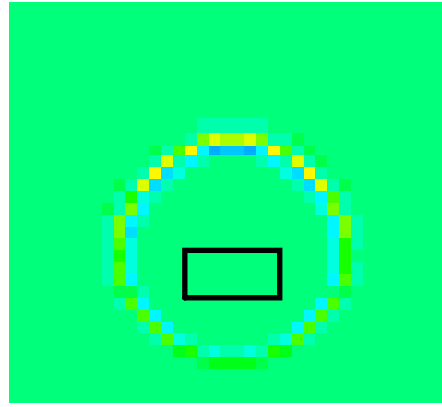
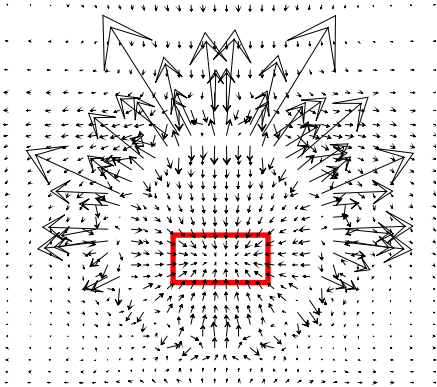
La présentation du modèle physique actuel permet de faire face à un certain nombre

de situations variées. Cependant, il faut envisager les variations avec la température des pression capillaire, des capacités calorifiques, de la chaleur latente de fusion ; et surtout considérer la vapeur comme un gaz réel. De plus, l'hypothèse d'équilibre thermodynamique écarte les possibilités d'hystérésis de la pression capillaire avec la saturation (dont l'importance est pourtant bien connue, notamment dans les cas d'infiltration), et de métastabilité de l'eau et de la vapeur. Dans ce contexte, on ne peut conserver une saturation irréductible non nulle, car toute eau présente dans la porosité cinématique devrait s'évaporer si la température augment suffisamment. Enfin, en admettant que la mise en place du dispositif expérimental élimine toute possibilité de présence d'air, on pourra continuer de le négliger dans les simulations. D'un point de vue numérique, la priorité semble d'éliminer la notion de saturation irréductible et de permettre à une phase de vapeur surchauffée seule d'apparaître. D'un côté plus accessoire, il faudrait également affiner l'approche numérique des forts débits d'eau imposés en amont, par exemple en condensant les matrices ou en utilisant un schéma décentré afin d'éviter des oscillations artificielles.

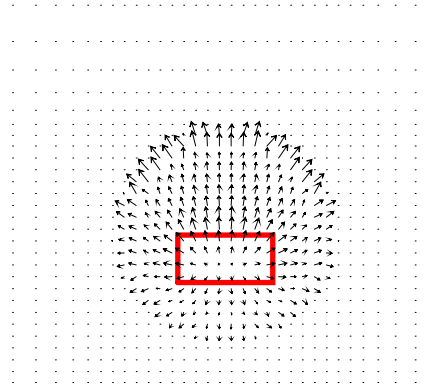
La comparaison aux résultats expérimentaux a montré que le fonctionnement qualitatif du système était capturé. De nouveaux calculs avec des paramètres physiques plus précis et plus représentatifs s'imposent. Il sera alors plus aisé d'interpréter les écarts entre températures observée et simulée en terme d'erreurs de précision numérique ou de modèle physique. Cependant, la limitation des capacités de calcul ne permet pas d'utiliser des maillages suffisamment fins, des pas de temps suffisamment courts, ni des critères de convergence suffisamment bas. D'autant plus que les Éléments Finis obligent à raffiner le maillage si l'on veut diminuer le pas de temps, pour satisfaire à un nombre de Fourier minoré (Cf. §5.2.2.3-Diffusion). Et même si c'était le cas, la diversité des cinétiques des différents phénomènes (effet caloduc très rapide, conduction thermique et vitesse hydraulique lente) grèverait de toute façon la précision de l'un ou l'autre des processus sur lesquels on fait une sorte d'impasse, puisque la précision numérique décroît, même en implicite, lorsque le nombre de Fourier devient important (*op. cit.*). Ainsi, on peut craindre que ce type d'expérience ne soit pas à même de valider ou d'invalider la modélisation de processus physiques comme l'hystérésis de saturation, la loi de Darcy pour la phase gazeuse, la pression capillaire aux faibles saturations, etc. Il faut envisager pour cela des expériences spécifiques. Par contre, la maquette MASCILIA remplit son rôle d'expérience fédératrice au sein de laquelle les dynamiques sont fortement couplées, et de défi à la modélisation intégrée de ce qui peut se produire lorsque l'on dépose des objets chauds dans une nappe phréatique perméable saturée.



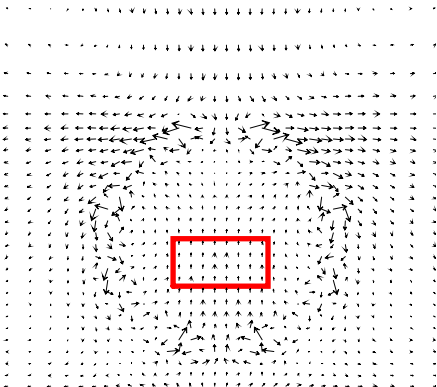
(a) Saturation

(b) Vaporisation ($kg/m^2/s$), positive en bleu, nulle en vert, négative en jaune

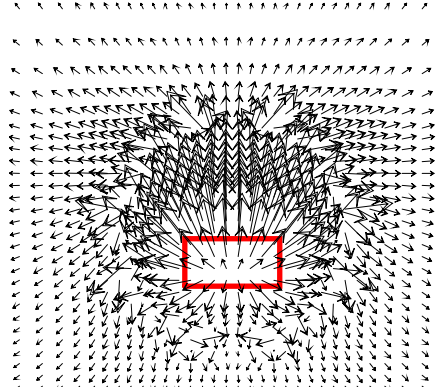
(c) Vitesse de Darcy de l'eau liquide



(d) Vitesse de Darcy de la vapeur

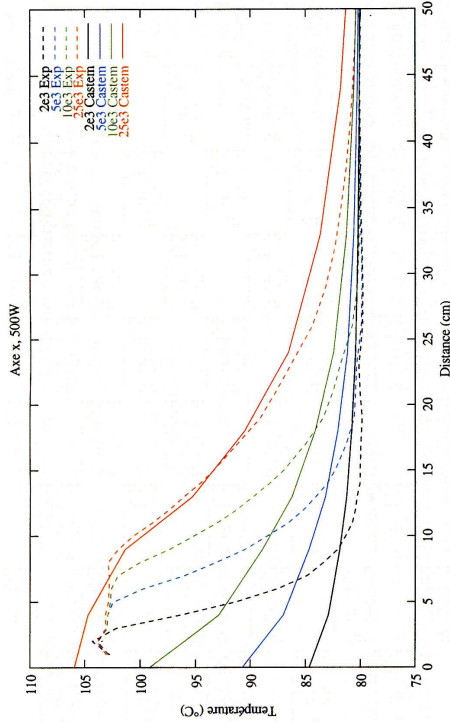


(e) Flux total d'eau

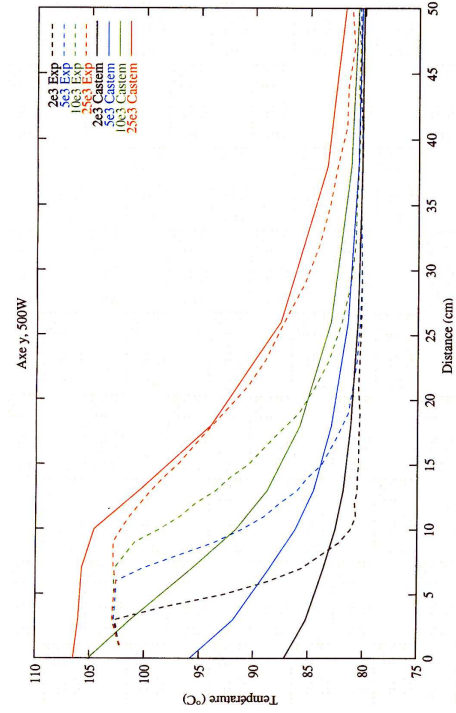


(f) Flux total de chaleur

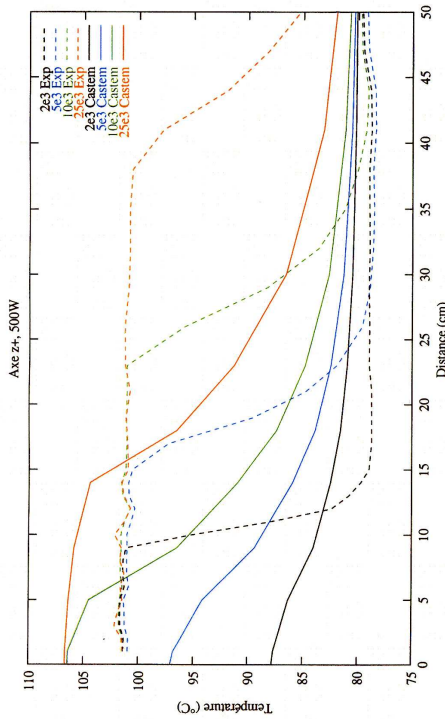
FIG. 1.11: Mise en évidence de l'effet Caloduc. $t = 72h$. Flux d'entrée nul. Le rectangle rouge figure la résistance chauffante, supposée ici perméable.



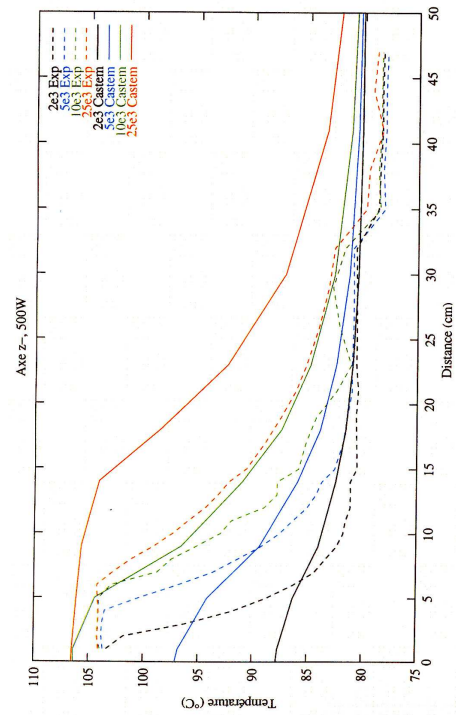
(a) le long de l'axe longitudinal



(b) le long de l'axe transversal



(c) sur la verticale montante



(d) sur la verticale descendante

 FIG. 1.12: Comparaison expérience (pointillé) / calcul (trait plein) des profils de température à $t = 2000, 5000, 10000$ et 20000 s, pour une puissance de 500 W, sans écoulement longitudinal forcé.

Deuxième partie

Transferts en milieux complexes

Introduction

Nous abordons, dans cette partie, l'étude des transferts en milieu complexe à partir d'un processus physique apparemment simple – le mouvement d'une particule entraînée par le mouvement de l'eau souterraine – au sein d'un milieu dont la complexité provient de son hétérogénéité.

Lorsque ce travail est réalisé, depuis presque dix ans, le transport de soluté non réactif en milieu poreux hétérogène est activement étudié par la communauté scientifique. C'est à la fois un phénomène physique crucial et un défi pour la modélisation. La compréhension de l'étalement d'un contaminant dans des aquifères souterrains est essentielle dans le domaine du stockage de déchets radioactifs. Cette question a été abordée par l'agence suédoise de gestion des déchets radioactifs, SKB, qui a mis en place le programme TRUE (Tracer Retention Understanding Experiment) à cet effet, en se focalisant sur les milieux fracturés. Ce projet souhaite mettre les modèles à l'épreuve d'observations expérimentales obtenues sur un site souterrain, à 400 *m* de profondeur, au Äspö Hard Rock Laboratory. Ce projet comporte plusieurs tâches, dont la quatrième, en particulier, comporte des tests de traçage dans une fracture isolée (ou pas trop connectée, voir Fig. 1.13a). Les tests réalisés comprennent des protocoles de pompage radial convergent, ou d'injection/pompage dipolaire à partir de différents points situés dans le plan de la fracture (voir Fig. 1.13b). Devant la difficulté qu'ont alors eu les modèles à reproduire les courbes de restitution expérimentales, en ayant recours, notamment, à l'ensemble de la démarche stochastique proposée par l'école de Dagan et Rubin et basée sur des développements perturbatifs, il est apparu nécessaire de préciser la notion de dispersivité – alors largement utilisée – et d'explorer dans quelle mesure prolonger les modèles qui tentent de l'évaluer. En effet, ces modèles supposent le plus souvent une faible hétérogénéité, des conditions aux limites à l'infini, un écoulement moyen uniforme et la gaussianité de la densité de probabilité de position particulière. Autant d'hypothèses dont on peut difficilement s'accommoder, nous allons le voir, lorsqu'on s'attaque à l'interprétation de tests de traçage sous pompage, et leur modélisation sur des grilles de dimensions finies.

Les deux chapitres qui suivent retracent les deux volets de ce travail d'exploration. Lorsque j'ai obtenu les premiers résultats de simulation en écoulement tournant, il est apparu nécessaire d'en décorrélérer l'influence des conditions aux limites, dont j'ai ensuite réalisé l'étude exhaustive. Je la présente en premier pour des raisons de

(a) Figuration, en coupe, des fractures (en couleur et traits fins) détectées par carottages à partir des deux niches. Les traits pointillés bleus représentent les fractures principales

(b) Différents motifs de test de traçage sous pompage/dipôle dans le plan de la fracture A. Les flèches figurent les directions de pompage.

FIG. 1.13: Tests de traçage dans une fracture relativement isolée du projet TRUE-1 [Winberg et al. 2000].

logique d'exposé, faisant donc une petite entorse à l'historique du travail. J'aborde au chapitre suivant le questionnement de la notion de dispersivité, notamment lorsque l'écoulement n'est pas uniforme. Ces travaux ont fait l'objet de la première publication sur le sujet (Cf. Annexe) bibl :maugis02b.

Afin de fixer les bases de la discussion qui va suivre, il convient de resituer ce que l'on entend, classiquement, par "dispersivité".

L'étalement d'un soluté provient principalement de diffusion moléculaire et de dispersion due à l'hétérogénéité du champ convectif, elle-même en partie générée par l'hétérogénéité du champ de perméabilité. La notion de dispersivité est liée spécifiquement au caractère aléatoire du champ de vitesse. A l'échelle macroscopique, qui est parfois difficile à définir, on l'appelle *macrodispersion*, parce qu'elle résulte de la moyenne sur une large zone spatiale (*homogénéisation*) d'un transport décrit à l'échelle d'un Volume Élémentaire Représentatif, la plus petite échelle possible au-dessus de laquelle perméabilité et loi de Darcy prennent un sens. Comme la dispersion représente en soi un processus d'homogénéisation, on la confondra avec le terme "macro-dispersion", et on réservera la qualification "micro-dispersion" à l'homogénéisation de processus dispersifs d'échelle inférieure.

Prenons un exemple simple pour illustrer cette homogénéisation. Si l'on néglige la diffusion moléculaire dans l'eau, et si le champ convectif est stationnaire au sens statistique; si, de plus, un panache de polluant décrit par sa concentration C en tout point, est ergodique, alors l'équation, à l'échelle du pore, du transport purement

convectif :

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(\vec{U}C) \quad (1.112)$$

conduit, après prise de moyenne d'ensemble, notée $\langle \text{hop} \rangle$, à l'équation de diffusion-convection :

$$\varepsilon \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} = -\text{div} \left[\langle \vec{U} \rangle \langle C \rangle - \overline{\overline{D}} \nabla \langle C \rangle \right] \quad (1.113)$$

où le coefficient de diffusion $\overline{\overline{D}}$ vaut $\overline{\overline{\alpha}} \cdot \|\langle \vec{U} \rangle\|$, $\overline{\overline{\alpha}}$ étant le tenseur de macrodispersion, et $\langle \vec{U} \rangle$ la vitesse de Darcy moyenne [Dagan 1989 ; Gelhar 1993]. La concentration $\langle C \rangle$ est alors représentative à l'échelle homogénéisée. ε est la porosité. D'un point de vue lagrangien, et avec les mêmes hypothèses, la macrodispersion est aussi égale à la demi-dérivée curviligne de la variance de position d'une unique particule lâchée dans un champ de vitesse aléatoire [op. cit.].

Il est bon de noter que la dispersion décrit seulement la partie gaussienne du transport du soluté. Dit autrement dans le cadre lagrangien, elle concerne seulement les moments d'ordre pair de position de particule, et au premier chef le moment d'ordre deux. Elle outrepassse ainsi tout contribution non gaussienne du transport qui aurait dû normalement figurer dans l'équation (1.113). On insistera sur les conséquences de cette observation au chapitre 3.

La dispersion d'un traceur matérialise, en terme de transport, la structure aléatoire du champ de vitesse cinématique. Ainsi, toute altération de cette structure a un impact sur la forme du panache résultant. Nous allons voir plus précisément au chapitre 2 comment la présence de conditions aux limites déterministes affecte la structure statistique du champ de vitesse, et par ricochet, l'étalement d'un panache. L'influence de la forme de l'écoulement et d'éventuelles singularités comme des puits de pompage ou d'injection sera étudiée ensuite, au chapitre 3.

Chapitre 2

Effet de conditions aux limites sur une modélisation stochastique

Résumé

L'évaluation de performance d'un stockage souterrain de déchets radioactif requiert une compréhension relativement fine des mécanismes d'écoulement et de transport en milieu géologique. Que celui-ci soit sédimentaire ou granitique, il présente en général un certain degré d'hétérogénéité. Les modèles stochastiques tentent de prendre en compte celui-ci, par exemple en linéarisant les équations de transport, et en faisant certaines hypothèses simplificatrices. En particulier, le milieu est supposé infini, et l'écoulement moyen uniforme. Les grandeurs clés comme le logarithme de la transmissivité Y , la charge H , la vitesse et la position de particule, sont supposées normalement distribuées. De plus, on admet que Y est une fonction aléatoire stationnaire. Nos derniers travaux ont pour but d'étendre la validité du modèle linéarisé à des écoulements non uniformes. Mais auparavant, il est nécessaire de vérifier les autres hypothèses. Ce chapitre constitue la première partie de cette étude en vérifiant par la méthode de Monte-Carlo la validité du modèle linéarisé, d'une part en analysant l'impact de la présence de conditions aux limites, et d'autre part en construisant les lois statistiques de position particulaire. Les calculs ont été menés dans Cast3M.

Les conditions aux limites influencent l'écoulement sur de courtes portées, et le transport sur de longues distances. En particulier, la dispersion transverse dépend fortement de la nature et de la distance des conditions aux limites latérales. La dispersion longitudinale est de son côté peu influencée par des conditions amont et aval de charge, mais très fortement ralentie lorsque ces conditions aux limites s'appliquent au flux hydraulique. Il semble cependant que la structure statistique de position reste gaussienne dans tous les cas, pourvu que la distance de parcours soit suffisante. La distance minimale pour obtenir cette gaussianité dépend de l'amplitude de l'hétérogénéité, et est de l'ordre de quelques longueurs de corrélation.

Introduction

Un domaine matériel borné est régi par un certain nombre de lois physiques. Il subit des sollicitations extérieures : termes sources et conditions aux limites, qui déterminent sa réponse. Ainsi, des conditions aux limites différentes correspondent à des problèmes physiques distincts. Par exemple, on peut générer un écoulement uniforme en imposant sur les frontières latérales, soit des conditions de flux nul

$\phi = 0$, soit une charge imposée linéaire $H = ax + b$ (Figure 2.1). Dans ce dernier cas, pourtant, la frontière n'est plus imperméable, et laissera passer une fraction de l'écoulement dans un sens ou dans l'autre pour peu que le milieu soit hétérogène.

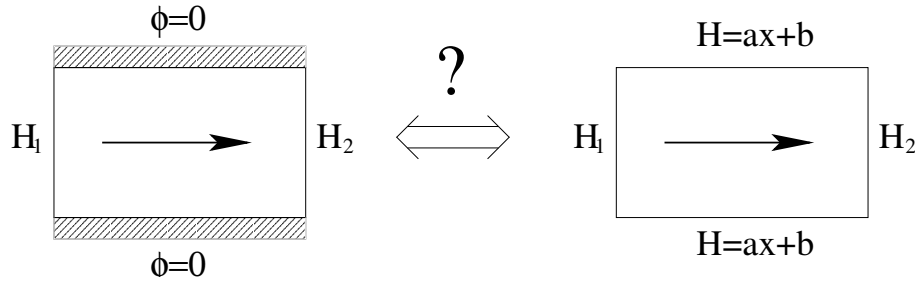


FIG. 2.1: Question de l'équivalence entre deux systèmes de conditions aux limites engendrant le même écoulement moyen

Lors d'une simulation numérique, le domaine est, par construction, borné. Se pose alors la question du choix des conditions aux limites, de façon à générer l'écoulement désiré. Traditionnellement, les modélisateurs utilisent des charges amont et aval fixées et des parois latérales imperméables, qui correspondent à une expérience de laboratoire classique. Pourtant, de telles conditions ne se présentent pas nécessairement dans la nature. Il est possible en particulier qu'un aquifère, limité par exemple par des rivières, ne soit soumis qu'à des conditions aux limites de charge. Tant que l'on ne s'intéresse qu'aux grandeurs moyennes de l'écoulement, les conditions aux limites ont peu d'impact ; par contre, si l'on considère le problème d'un point de vue stochastique, la différence est cruciale. En effet, les conditions aux limites introduisent un caractère déterministe sur les bords du domaine, dont la nature de l'incidence et sa portée dépendent de la grandeur bloquée (charge ou flux sortant). En tout état de cause, on espère que l'influence déterministe des conditions aux limites s'estompe lorsque l'on s'en éloigne ; ce qui, comme nous allons le voir, n'est pas garanti.

Dès 1979, Smith et Freeze mettent en évidence, par méthode Monte-Carlo en 1D et 2D, la forme caractéristique, en cloche, de la variance de charge le long d'une ligne parallèle à l'écoulement entre deux conditions aux limites de charge imposée [Smith et Freeze 1979]. Dagan (1982) a calculé analytiquement cette variance au sein d'une bande 2D infinie délimitée par deux lignes de charge imposée. Il y fait un certain nombre d'hypothèses calculatoires que nous détaillons plus loin, dont l'hypothèse de gaussianité de la log-transmissivité Y . Plus tard, Rubin (1988,1989) a étudié théoriquement l'impact sur la covariance de charge/log-transmissivité $C_{yh}(\vec{x}, \vec{x}')$ et sur l'autocovariance de charge $C_{hh}(\vec{x}, \vec{x}')$ de (i) une condition à la limite de charge le long d'une ligne infinie perpendiculaire à l'écoulement moyen (uniforme), et (ii) une condition de flux nul le long d'une ligne infinie parallèle à cet écoulement. Roth (1995) étudia un domaine non plus semi-infini mais carré, en prenant en compte l'apport déterministe des quatre bords. Entre autres résultats, il obtint

analytiquement les corrélations C_{yh} et C_{hh} pour une séparation fixée, compte tenu d'une corrélation de transmissivité à portée finie. Il met notamment en évidence une distance à partir de laquelle ces corrélations ne sont plus affectées. Citons aussi le travail similaire de [Osnes 1995] qui a étudié analytiquement et par simulation Monte-Carlo les structures de corrélation de Y et de H dans un milieu borné du même type que les précédents. Un peu plus tôt, Bellin (1992), dans un très intéressant passage en revue de méthodes numériques, a été le premier à s'intéresser à l'impact des conditions aux limites sur la variance de vitesse. Bellin observe un très net impact des conditions aux limites sur les variances de la vitesse de Darcy, le flux étant imposé sur tous les côtés. On peut trouver d'après lui une région à l'abri de ces effets, d'autant plus petite que l'écart-type de log-transmissivité σ_y est grand. Dans cette lignée, et postérieurement à mon travail (1999), Lessof et al. (2000) ont calculé *via* un modèle linéarisé, les variances des charges, vitesse et position particulière en l'aval immédiat d'une condition de flux imposé, perpendiculaire à la vitesse moyenne. En pratique, nous ne nous sommes pas intéressés à ce type de condition aux limites, mais nous verrons l'analogie de leurs prévisions théoriques avec ce que les simulations montrent dans le cas de flux latéraux imposés.

A notre connaissance, au moment de la réalisation de ce travail et même jusqu'à présent, ni l'effet de conditions latérales de charge sur l'écoulement, ni l'impact de conditions aux limites sur le transport de particules – à l'exception de la modification de la dispersion longitudinale par une vitesse amont imposée [*op. cit.*] – n'ont encore été étudiés.

Imposer une condition aux limites équivaut, d'un point de vue stochastique, à annuler les fluctuations d'une grandeur le long d'une ligne. Les valeurs imposées génèrent l'écoulement moyen et ont également une incidence sur la réaction stochastique du milieu. Dans le cas de l'écoulement uniforme en milieu infini, cette dernière est bien décrite par le modèle linéarisé développé par Dagan [Dagan 1989] lorsque l'écart-type du logarithme de la transmissivité est inférieur à 1. On peut alors efficacement identifier l'influence des conditions aux limites.

Après avoir exposé la méthode numérique dans une première partie, nous présentons les résultats obtenus par simulation, accompagnés par les justifications théoriques correspondantes. Ils portent sur l'analyse de l'effet des conditions aux limites sur l'écoulement (deuxième partie) et sur le transport (troisième partie). Lors des développements analytiques, on se place dans le cadre du modèle linéarisé développé par Dagan.

Ces travaux ont fait l'objet d'une présentation en colloque [Maugis et Mouche 1998], annexée à ce document.

2.1 Principe de la simulation

Le principe de la simulation a déjà été exposé par [Mouche et Lemaire 1995]. On résout le problème d'un écoulement uniforme 2D en milieu hétérogène. En se plaçant dans le cadre de l'hypothèse de Dupuit statuant que l'écoulement est indépendant de la profondeur, le paramètre physique de l'écoulement devient la transmissivité, intégrale verticale de la perméabilité d'un aquifère par exemple. Par simplification, on prendra une hauteur de strate unitaire, ce qui revient à confondre, à l'unité près, transmissivité et perméabilité d'une part, vitesse et flux linéique d'autre part. On note Y le logarithme de la transmissivité, y sa fluctuation, σ_y son écart-type et λ son échelle intégrale. Le modèle exponentiel est choisi pour décrire la corrélation de Y . La porosité intervient en modifiant la vitesse microscopique par rapport à la vitesse de Darcy. On ne s'intéresse pas ici aux hétérogénéités de la porosité et, lorsqu'elle est constante, elle change simplement l'échelle des temps. Le problème ne perd en rien de sa généralité en prenant une porosité constante égale à l'unité.

Les champs de transmissivité sont générés sur un domaine rectangulaire (Figure 2.2) par la méthode de décomposition matricielle, telle que $\langle Y \rangle = -4$, et λ est égal à l'unité (il servira d'unité de longueur). Y suit donc une loi gaussienne. Le modèle exponentiel est choisi pour la loi de corrélation de y , à savoir $C_{yy}(r) = \sigma_y^2 \exp(-r/\lambda)$, dont une des propriétés est que la longueur de corrélation est égale à l'échelle intégrale. Le gradient de charge moyen est choisi tel qu'il produise une vitesse moyenne statistique en milieu infini égale à l'unité (il permettra de définir une échelle de temps). Notons que si c'est la charge qui est imposée en amont et en aval, on ne peut plus garantir la norme de la vitesse moyenne spatiale. Celle-ci peut différer sensiblement de la moyenne statistique théorique, invalidant l'hypothèse d'ergodicité. Les champs de vitesse de Darcy sont ensuite calculés par la méthode des Éléments Finis Mixtes Hybrides [Dabbene 1995]. Les simulations ont été conduites pour quatre valeurs de l'écart-type de transmissivité : $\sigma_y = 0,1 ; 0,5 ; 1$ et $1,5$.

Les paramètres du problème sont : les dimensions du domaine (normalisées par λ) ; l'hétérogénéité du milieu, caractérisée par σ_y ; la nature des conditions aux limites (charge ou flux).

Plusieurs séries de calcul sont conduites, en imposant sur les bords latéraux soit la charge, soit le flux (Voir Fig. 2.3). Le troisième cas à flux imposé partout est en principe mal posé d'un point de vue numérique et il faudrait en principe au moins un point de charge imposé, afin de fixer l'échelle de charge. Cependant, notre problème ne dépendant pas d'une valeur absolue de référence pour la charge, mais seulement de ses variations et de ses fluctuations, il n'est pas nécessaire d'avoir recours à un point de charge imposé. Plusieurs valeurs de σ_y sont explorées (0,1 ; 0,5 ; 1 et 1,5), avec trois géométries différentes :

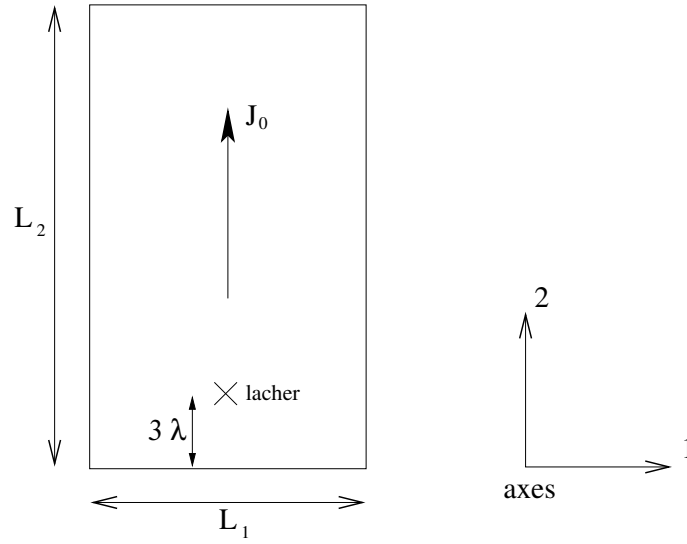


FIG. 2.2: Quelques définitions du domaine d'étude : \vec{J}_0 est le gradient de charge à l'ordre 0, λ la longueur de corrélation de perméabilité. La croix figure le point de lâcher de particules pour l'étude du transport.

- domaine rectangulaire, de dimensions $21\lambda \times 13\lambda$, discrétisé à $\Delta x = \lambda/4$.
- domaine carré, de côté 17λ , discrétisé à $\lambda/4$,
- domaine carré, de côté 20λ , discrétisé à $\lambda/8$,

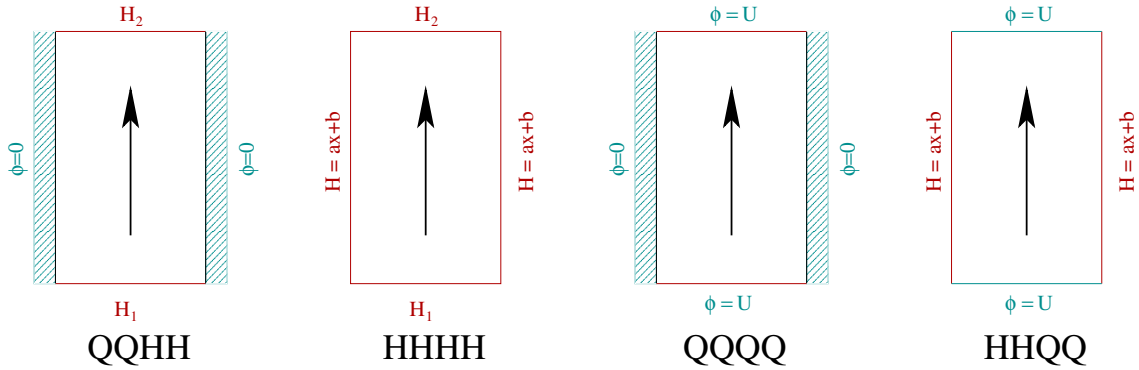


FIG. 2.3: Les quatre types de conditions aux limites considérés.

QQHH : charge imposée amont/aval, flux latéraux nuls ; HHHH : charge imposée sur tout le pourtour ; QQQQ : flux imposé sur tout le pourtour ; HHQQ : flux imposée amont/aval, charges latérales imposées.

Maillage σ_y	$21\lambda \times 13\lambda$ $\Delta x = \lambda/4$		$17\lambda \times 17\lambda$ $\Delta x = \lambda/4$		$20\lambda \times 20\lambda$ $\Delta x = \lambda/8$
	QQHH	HHHH	QQHH	HHHH	QQHH
0,1	800	800	800	800	-
0,5	1000	1000	1000	1000	1000
1,0	1500	1500	1500	1500	-
1,5	2000	2000	2000	2000	-

TAB. 2.1: Nombre de réalisations pour chaque calcul.

2.2 Effet de conditions aux limites déterministes sur l'écoulement

Afin de mesurer la portée et l'amplitude de l'influence des conditions aux limites, on a étudié les évolutions des moments statistiques de la charge aux centres des faces, et de la vitesse aux centres des éléments, le long des deux lignes médianes du domaine. Pour établir ces évolutions, on génère un grand nombre de réalisations de champs de Y (Cf. Tableau 2.1), et on prélève les valeurs de charge et vitesse pour chacune d'entre elles en une série de points disposés suivant les lignes médianes. Un traitement statistique donne ensuite les moyennes, variances et écart-types de chaque quantité en chacun de ces points. Les covariances à séparation non nulle n'ont pas été calculées.

On rappelle que, contrairement à l'intuition, l'axe 1 est l'axe transverse et l'axe 2 est l'axe longitudinal (Fig. 2.2).

2.2.1 Effet des conditions aux limites sur la charge

2.2.1.1 Évolution longitudinale avec charge imposée en amont et en aval

L'effet sur l'écart-type de charge des charges longitudinales imposées se combine avec celui des conditions aux limites latérales. Il se matérialise différemment selon que ces dernières sont de type Dirichlet (charge imposée, cas HHHH, Fig. 2.3a) ou Neumann (flux imposé, cas QQHH, Fig. 2.3b).

Nous avons porté sur les figures la solution analytique (2.1) de Dagan [*Dagan 1982*, éq. 116] exprimant la variance de charge dans une bande plane délimitée par deux droites de charge imposée (voir Figure 2.5 son évolution en fonction de la taille domaine). Son calcul repose sur un développement perturbatif au premier ordre. Entre autres hypothèses de calcul, il ramène la corrélation de transmissivité à un Dirac dont l'amplitude est telle que l'intégrale sur tout le domaine soit conservée,

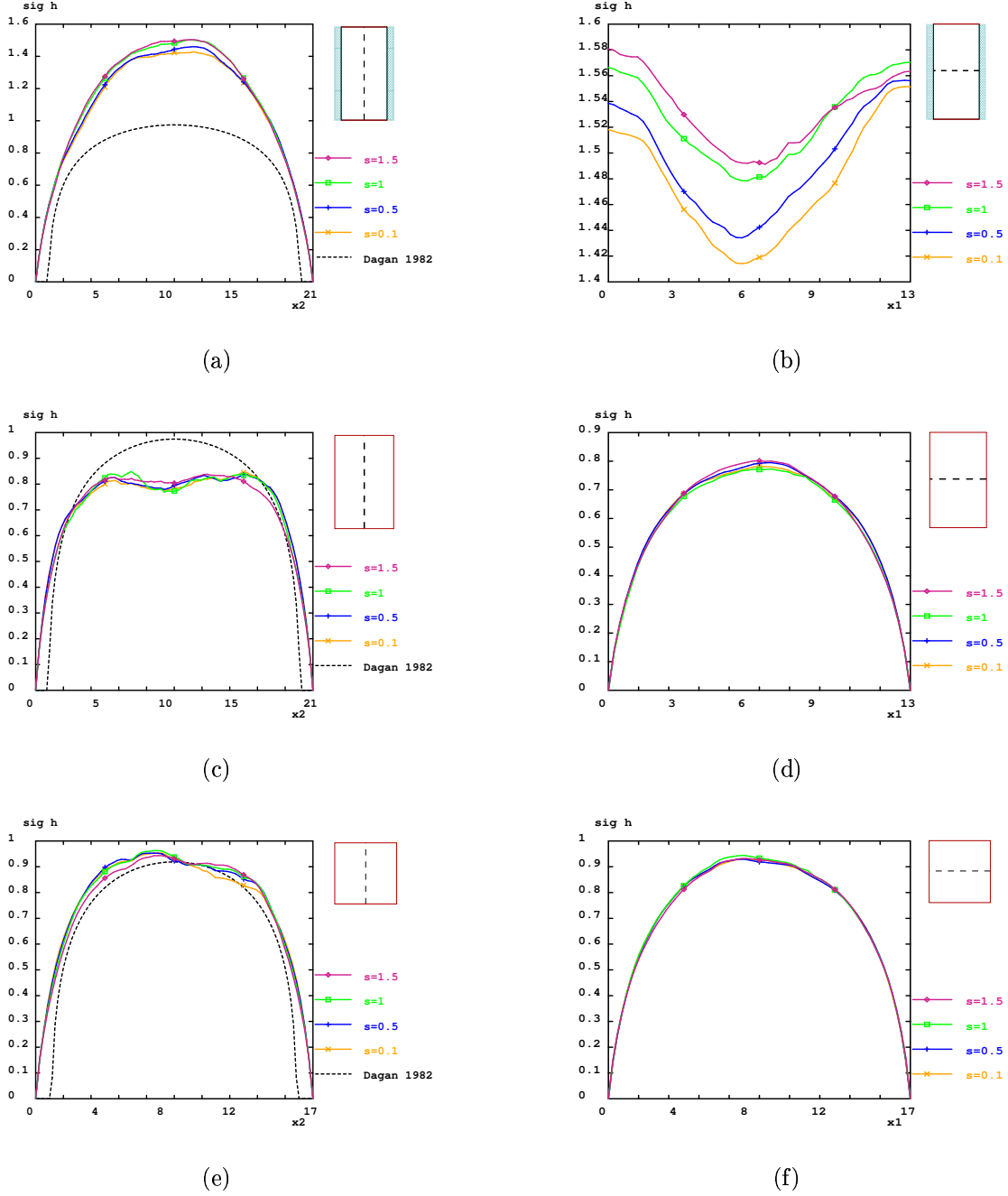


FIG. 2.4: Évolution de l'écart-type de charge normalisé $\sigma_h/\sigma_y J_0 \lambda$ sous l'effet de différentes conditions aux limites (domaine $21\lambda \times 13\lambda$). Les encarts indiquent la droite support et le type de CL. (Cf. code couleur Fig. 2.3)

afin de ramener le double produit de convolution de C_{yy} à une intégrale simple. Puis, il omet la contribution d'un disque de rayon λ à cette dernière intégrale non définie. De plus, la formule n'est pas valable au voisinage des bords. Insistons sur le fait que ce modèle considère un milieu infini transversalement, et donc dépourvu

de conditions aux limites latérales.

$$\sigma_h^2(x) = \frac{1}{4\pi} J^2 \sigma_y^2 \lambda^2 A \left[\ln \frac{\sin \pi x / L}{\pi \lambda / L} \right] \text{ pour } 0 < x < L \quad (2.1)$$

La valeur de A s'appliquant à la corrélation de transmissivité exponentielle que nous utilisons ici est 2π (quand la corrélation de transmissivité est linéaire à portée finie, $A = \pi/3$).

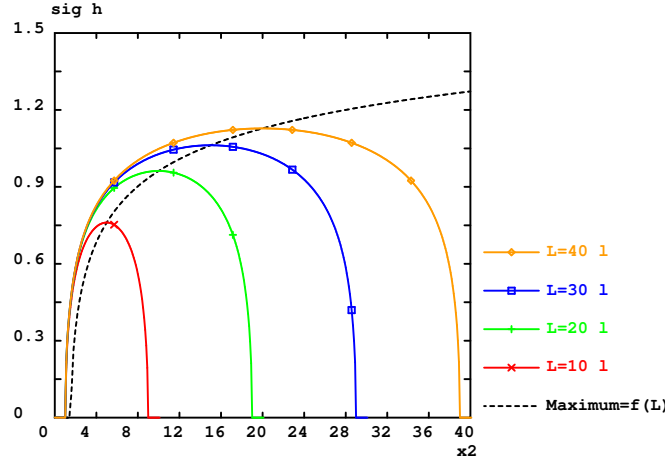


FIG. 2.5: Écart-type de charge normalisé $\sigma_h/\sigma_y J_0 \lambda$ entre deux conditions aux limites longitudinales de charge, prédite par Dagan, pour différentes longueurs de domaine (exprimées en longueurs de corrélation λ).

Flux latéraux nuls

L'écart-type de charge prend nettement la forme d'une cloche (Fig. 2.4(a)) : nul là où la charge est imposée, il est maximal à équidistance des conditions aux limites. Il est difficile d'affirmer la présence d'un plateau de variance stationnaire en zone centrale (au-delà de 7λ des bords). Même si les courbes numériques respectent l'allure générale de celle donnée par le modèle de Dagan, les premières ont des valeurs significativement plus élevées que la deuxième. Si cela est dû aux limites latérales imperméables, cet effet devrait s'estomper en augmentant la largeur du domaine. Et effectivement, l'écart passe de 50% sur un domaine de largeur 13λ (Fig. 2.4(a)) à 26% sur le domaine carré de côté 17λ (non représenté). Le comportement de σ_h diffère lorsque l'on remplace les bords imperméables par des lignes de charge imposée :

Charges latérales imposées

Une nette stabilisation de l'écart-type de charge apparaît à quelques λ des bords amont et aval lorsque l'on suit la ligne médiane longitudinale du domaine rectangle (Fig. 2.4(c)). L'influence sur la variance de charge d'une charge imposée semble donc finie. C. Roth trouve en effet une zone de stationnarité de la charge à partir

de quelques λ des bords [Roth 1995, page 100], bien qu'il étudie le variogramme de charge à séparation donnée et non pas la variance. De plus, il utilise une corrélation de transmissivité de type sphère dure à portée finie ; mais de l'avis général, la forme de la corrélation de transmissivité joue un rôle accessoire dans le comportement stochastique de l'écoulement.

Pourtant, sans pour autant interdire la stabilisation de σ_h dans un sous-domaine, Dagan [Dagan 1982, éq. (116)] prédit une plus grande amplitude des fluctuations de charge en zone centrale ainsi qu'un palier moins marqué (Fig. 2.4(c)). L'origine du palier observé pour σ_h doit être recherchée ailleurs que dans l'effet des conditions aux limites longitudinales. En effet, lors d'une étude sur un domaine plus large (17λ au lieu de 13), l'accord entre les résultats de simulation et le modèle de Dagan devient bien meilleur, et le palier s'estompe considérablement, ce qui laisse penser qu'on est probablement face à une influence des conditions aux limites latérales.

2.2.1.2 Évolution transverse avec charge imposée en amont et en aval

Charges latérales imposées

On retrouve la forme en cloche (Fig. 2.4(d)) déjà obtenue pour un milieu confiné entre deux lignes de charge imposée. Remarquons deux choses :

1. Il n'y a pas de plateau apparent,
2. la valeur atteinte sur le plateau de l'évolution longitudinale est égale à la valeur maximale atteinte sur l'évolution transverse.

Flux latéraux nuls

L'écart-type de charge est maximal là où le flux est imposé (Fig. 2.4(b)) et se creuse à mesure qu'on s'approche de l'axe médian longitudinal. L'amplitude de variation, 6 à 8 %, est relativement faible bien que la tendance soit bien marquée. Ce résultat est conforme à l'analyse effectuée par Dagan [Dagan et Nguyen 1989] concluant en particulier à l'augmentation de la variabilité de la charge lorsque l'on fixe un flux nul sur une droite parallèle à l'écoulement. A ce stade, il est impossible de séparer, dans la variation de σ_h , les effets respectifs des conditions aux limites latérales et longitudinales. Le calcul mené sur le domaine $17\lambda \times 17\lambda$ (non représenté) montre une variation de plus grande amplitude (12 % lorsque $\sigma_y = 1$). Lessof et al. (*op. cit.*) trouveront qu'imposer le flux longitudinalement augmente comparablement la variance de charge au voisinage de la frontière amont.

2.2.1.3 Conclusion : Impact de conditions aux limites sur l'écart-type de charge

Une condition à la limite est très contraignante en son voisinage (par exemple, une condition de charge impose une variance de charge nulle), et relâche progressivement sa contrainte à mesure que l'on s'en éloigne. Que cette contrainte finisse par

s'annuler ou non, on comprend que la variance de charge soit de plus en plus sujette à des sollicitations supplémentaires lorsque l'on s'éloigne des bords, et d'autant plus résistante que les bords sont proches. C'est donc la tendance engendrée par le couple de segments parallèles les plus rapprochés qui va le plus fortement affecter l'autre. Ainsi :

1. Dans le cas du domaine $21\lambda \times 13\lambda$ avec charge imposée partout, les conditions latérales de charge imposent leur faible valeur de σ_h le long de la ligne médiane longitudinale, créant ainsi le plateau que l'on observe. Sur le domaine carré, les valeurs imposées par chaque couple de droites parallèles sont compatibles, et par conséquent elles ne s'affectent pas mutuellement. Les évolutions de σ_h sont alors semblables (comparer les Fig. 2.4(e) et Fig. 2.4(f)), et qui plus est, en très bon accord avec la prédiction de Dagan. L'approche de ce dernier paraît ainsi validée.
2. Dans le cas du domaine $21\lambda \times 13\lambda$ avec charge imposée sur les bords longitudinaux et flux nuls sur les côtés, tout se passe comme si les C.L. latérales tiraient σ_h vers les fortes valeurs, tandis que les C.L. longitudinales tirent – avec moins de succès vu le plus grand éloignement de leurs supports – σ_h vers les valeurs du modèle de Dagan. Lorsque le domaine est carré, σ_h est plus fortement affecté transversalement : 12% au lieu de 8% , et en effet le domaine est plus large ; et σ_h est moins affecté longitudinalement : 25% au lieu de 45% , et en effet, le domaine est plus court.

Par ailleurs, le modèle linéarisé démontre qu'en deux dimensions, l'écart-type de charge n'atteint pas de valeur asymptotique, quoiqu'il augmente lentement au-delà d'une certaine distance en suivant une loi logarithmique [*Dagan 1989* ; *Gelhar 1993*]. On retrouve un tel comportement dans les prédictions de Dagan (Fig. 2.5) : l'écart-type maximum de charge augmente peu à partir d'une certaine longueur de domaine, tout en étant étroitement dépendant, et les valeurs de σ_h sont stables autour du maximum, formant un plateau de mieux en mieux défini.

Concluons sur le comportement de l'écart-type de charge en présence de conditions aux limites :

1. L'approche de Dagan [*Dagan 1982*] est validée par nos simulations.
2. Contrairement à l'interprétation de C. Roth (1995), la portée de l'effet d'une condition à la limite sur la charge est infinie, même si l'intensité de cet effet décroît avec la distance.
3. Les conditions aux limites sur les bords longitudinaux interagissent étroitement avec celles imposées sur les bords latéraux, les contraintes stochastiques les plus faibles cédant le pas aux contraintes les plus fortes. L'éloignement aux conditions aux limites est à ce titre un facteur dominant.

2.2.2 Effet des conditions aux limites sur la vitesse

Aucune différence significative sur les moments de vitesse n'est observable entre les domaines de taille différentes – à savoir $21\lambda \times 13\lambda$, $17\lambda \times 17\lambda$ et $20\lambda \times 20\lambda$. Les résultats qui suivent sont valables pour ces trois domaines, mais seules sont présentées les figures correspondant au domaine rectangulaire $21\lambda \times 13\lambda$.

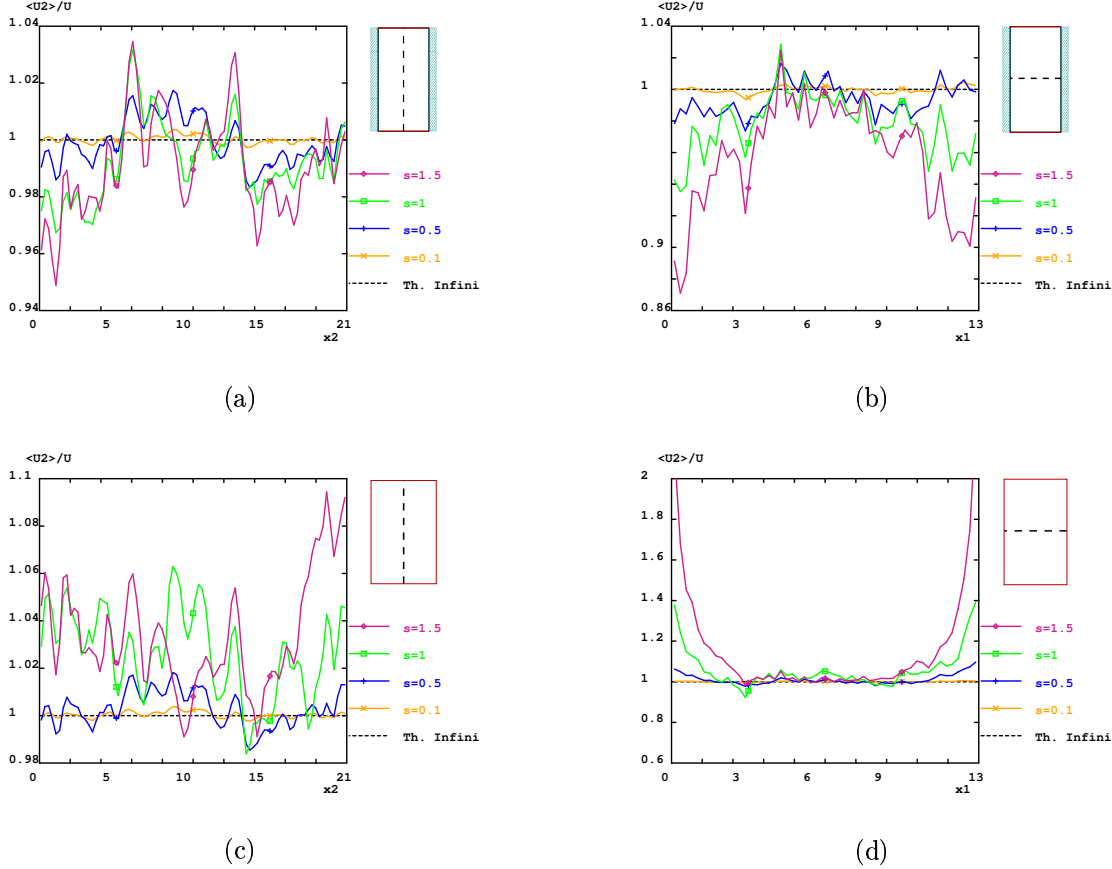


FIG. 2.6: Évolution de la moyenne de vitesse longitudinale $\langle U_2 \rangle$ sous l'effet de différentes conditions aux limites (domaine $21\lambda \times 13\lambda$). Les encarts indiquent la droite support et le type de CL (Cf. code couleur Fig. 2.3).

2.2.2.1 Évolution longitudinale avec charge imposée en amont et en aval

Contrairement à ce qui peut être observé sur la charge, les évolutions des grandeurs statistiques de vitesse le long de la médiane longitudinale sont très peu affectées par la nature des conditions aux limites latérales (comparer les sous-figures (a) et (c) des Fig. 2.6, 2.7 et 2.8). C'est pourquoi, nous ne commentons dans ce paragraphe que les résultats obtenus en imposant des flux nuls sur les bords latéraux (Fig. 2.6(a), 2.7(a) et 2.8(a)). Le tableau 2.2 suivant résume l'influence des conditions aux limites longitudinales de charge sur la vitesse. On y a porté également le biais observé provenant de la simulation par rapport à la prévision théorique. Ce biais

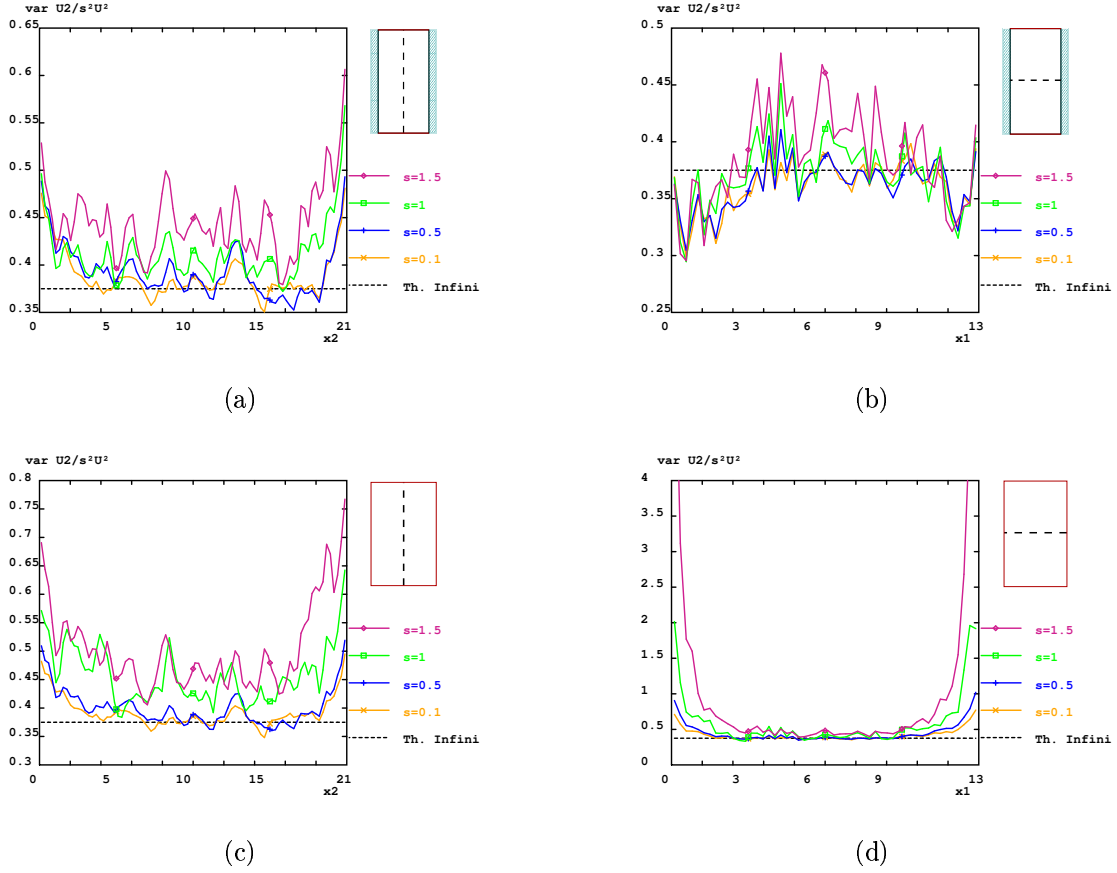


FIG. 2.7: Évolution de la variance de vitesse longitudinale $\sigma_{U_2}^2$ sous l'effet de différentes conditions aux limites (domaine $21\lambda \times 13\lambda$). Les encarts indiquent la droite support et le type de CL (Cf. code couleur Fig. 2.3).

résulte à la fois d'imprécisions dues à la méthode numérique et de l'invalidité de la prévision théorique aux grands écart-types de transmissivité.

σ_y	$\langle U_2 \rangle$	$\langle U_1 \rangle$	$\sigma_{u_2}^2$	$\sigma_{u_1}^2$
0,1	—	—	croît, 2 à 3 λ	$\rightarrow 0$, 2 λ (-10 %)
0,5	—	—	croît, 3 λ	$\rightarrow 0$, 2 λ (+10 %)
1,0	—	—	croît, 3 λ	$\rightarrow 0$, 2 λ (+20 %)
1,5	—	—	croît, 3 λ	$\rightarrow 0$, 2 λ (+30 %)

TAB. 2.2: Influence sur la vitesse des conditions aux limites de charge amont et aval. Les biais constatés, indépendants des conditions aux limites, sont indiqués entre parenthèses. La notation " $\rightarrow 0$ " ou "croît" décrit le comportement au voisinage des conditions aux limites. La portée de ces variations est écrite en terme d'un certain nombre de longueurs de corrélation λ . $\langle X \rangle$ et σ_x : moyenne et écart-type de X .

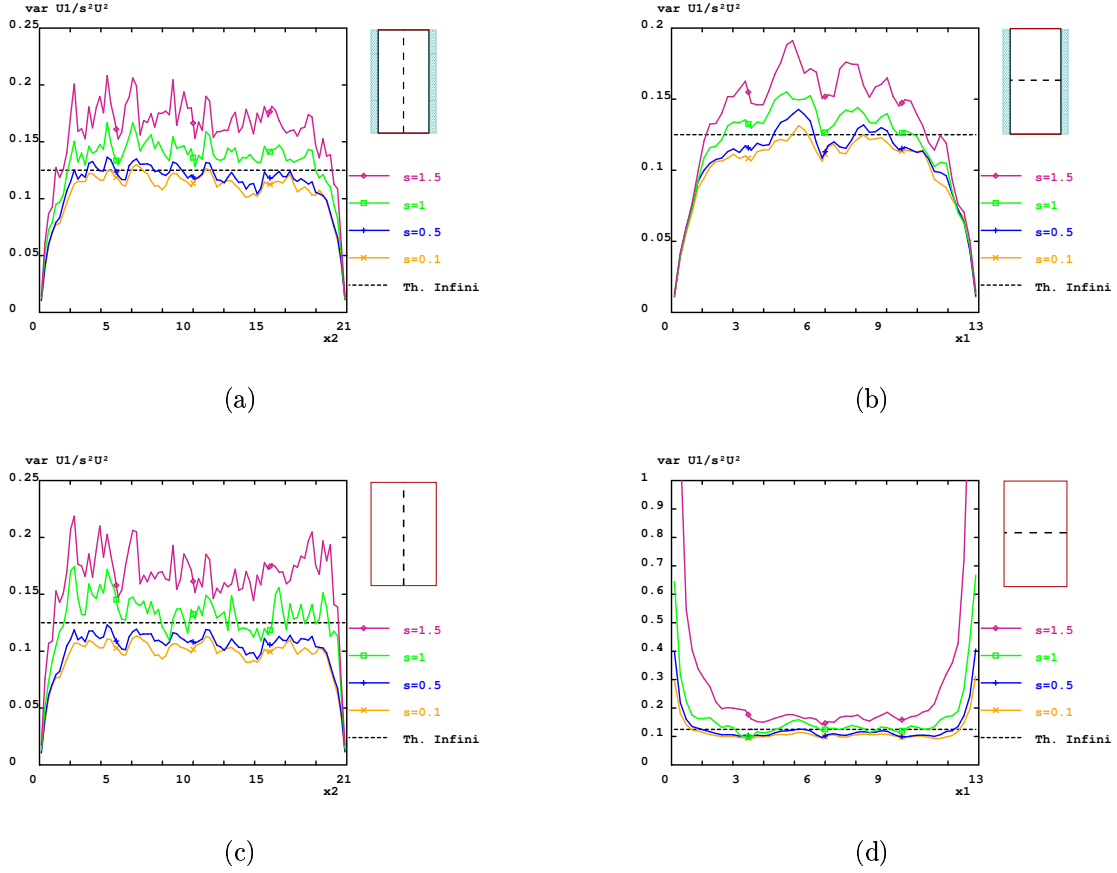


FIG. 2.8: Évolution de la variance de vitesse transverse $\sigma_{U_1}^2$ sous l'effet de différentes conditions aux limites (domaine $21\lambda \times 13\lambda$). Les encarts indiquent la droite support et le type de CL (Cf. code couleur Fig. 2.3).

La portée de conditions aux limites de charge longitudinale n'est que de 3λ sur la variance de vitesse. Les moyennes ne sont pas affectées. En revanche, la variance de vitesse longitudinale augmente au voisinage de la C.L. de charge, mais sur de courtes distances. La variance de vitesse transverse s'annule à l'approche de la C.L. de flux imposé. Ces résultats concordent avec ceux présentés par Bellin (1992) sur l'effet de telles conditions aux limites sur les variances de vitesse, bien qu'il soit difficile de les comparer avec précision. En effet, Bellin utilise un maillage plus grand discrétisé deux fois plus finement, chaque réalisation étant générée par la méthode des bandes tournantes (induisant une structure de corrélation légèrement différente), et pour d'autres valeurs de σ_y .

2.2.2.2 Évolution transverse avec flux imposé sur les bords latéraux

Le Tableau 2.3 résume l'influence des conditions aux limites latérales de flux sur la vitesse (voir Fig. 2.6(b), 2.7(b) et 2.8(b), ainsi que les biais observés sur les simulations.

σ_y	$\langle U_2 \rangle$	$\langle U_1 \rangle$	$\sigma_{u_2}^2$	$\sigma_{u_1}^2$
0,1	—	—	légère	$\rightarrow 0, 3\lambda$ (-10 %)
0,5	—	—	décroissance	$\rightarrow 0, 3\lambda$ (+ 0 %)
1,0	$\rightarrow -5\%$, 4λ	—	jusqu'à -20 %	$\rightarrow 0, 3\lambda$ (+10 %)
1,5	$\rightarrow -10\%$, 4λ	—	portée 3λ	$\rightarrow 0, 3\lambda$ (+15 %)

TAB. 2.3: Influence sur les moyennes et variances de vitesse des conditions aux limites latérales de flux. Voir légende tableau 2.2.

La vitesse moyenne et sa variance diminuent faiblement au voisinage de la condition de flux. La variance de vitesse transverse s'annule là où on a imposé un flux nul, bien évidemment. La portée de la condition à la limite est d'environ 3λ sur la variance de vitesse transverse, et quasiment sans effet sur les autres moments de vitesse. Il est à noter que Lessof et al. (*op. cit.*) prévoient une portée de 2 à 3λ sur l'annulation de l'écart-type de vitesse longitudinale au niveau d'une frontière amont de flux imposé, tout-à-fait analogue à ce qu'on observe ici. En contraste, ils trouveront un fort accroissement de la variance de vitesse transverse, à comparer avec la faible atténuation de la variance longitudinale près de notre condition à la limite.

2.2.2.3 Évolution transverse avec charge imposée sur les bords latéraux

Nous portons dans le Tableau 2.4 les moyennes et variances de vitesse telles qu'elles sont affectées par la condition latérale de charge, ainsi que la portée de cette influence (voir Fig. 2.6(d), 2.7(d) et 2.8(d)). Les biais de la simulation ne sont pas indiqués, mais ils sont du même ordre que ceux observés Tableau 2.3 avec un autre type de condition à la limite.

σ_y	$\langle U_2 \rangle$	$\langle U_1 \rangle$	$\sigma_{u_2}^2$	$\sigma_{u_1}^2$
0,1	—	—	$\rightarrow \times 2,4 ; 2\lambda$	$\rightarrow \times 3,7 ; 2\lambda$
0,5	$\rightarrow \times 1,12 ; 3\lambda$	—	$\rightarrow \times 3,3 ; 2\lambda$	$\rightarrow \times 5,1 ; 2\lambda$
1,0	$\rightarrow \times 1,54 ; 3\lambda$	—	$\rightarrow \times 7,8 ; 3\lambda$	$\rightarrow \times 12,5 ; 2\lambda$
1,5	$\rightarrow \times 2,62 ; 3\lambda$	—	$\rightarrow \times 30,4 ; 4\lambda$	$\rightarrow \times 57,4 ; 2\lambda$

TAB. 2.4: Influence sur les moyennes et variances de vitesse des conditions aux limites latérales de charge. Voir légende tableau 2.2.

La vitesse longitudinale moyenne augmente au voisinage des lignes de charge imposée, et ce, d'autant plus que σ_y est élevé. Après une distance de 3λ , elle retrouve la valeur stationnaire. Les écart-types de vitesse augmentent dans un rapport beaucoup plus grand que la vitesse moyenne, tout en étant soumis sur une

distance comparable à l'influence de la condition à la limite .

Les biais sur les variances proviennent de la lente convergence de la simulation Monte-Carlo, d'une part, et de ce que les vitesses dont on extrait les moments sont des vitesses aux centres des mailles, obtenue en moyennant les débits aux faces des mailles, d'autre part. Dans la méthode aux éléments finis mixtes hybrides que nous utilisons, les débits aux faces sont des variables duales, directement fournies par la résolution et donc, porteuses d'un maximum d'information. En les combinant arithmétiquement entre eux pour obtenir les vitesses aux centres des éléments, sous l'hypothèse d'une variation linéaire, on opère implicitement une moyenne qui diminue l'observation des fluctuations de vitesse. Compte tenu de l'orthogonalité des mailles, on aurait pu avantageusement, en complexifiant légèrement l'algorithme, afficher les variances de vitesse aux faces.

2.2.2.4 Conclusions : Impact de conditions aux limites sur la vitesse de Darcy

Les quatre grandeurs considérées sont les moyennes et variances de U_1 et U_2 .

moyenne de vitesse longitudinale : Elle est affectée par les conditions aux limites latérales en décroissant légèrement lorsque c'est une condition de flux, et en augmentant rapidement avec σ_y lorsque c'est une condition de charge.

moyenne de vitesse transverse : aucun effet

variance de vitesse longitudinale : Les C.L. ont une portée de 3λ environ, et induisent une forte augmentation ou une faible diminution en leur voisinage suivant qu'elles imposent la charge ou la flux.

variance de vitesse transverse : fortement contrainte par les C.L., elle s'annule le long d'une limite longitudinale de charge ou latérale de flux, et augmente fortement à l'approche d'une limite latérale de charge imposée. La portée d'une C.L. de charge est légèrement plus faible que celle d'une ligne de flux puisqu'elle n'est que de 2λ contre 3λ .

Les moments de vitesse de Darcy montrent ainsi une grande sensibilité aux conditions aux limites. L'influence de ces dernière ne se manifeste sur les moyennes et variance que sur des distances relativement courtes. Ces informations ne suffisent cependant pas pour connaître au voisinage de conditions aux limites le comportement des corrélations de vitesse à séparation non nulle, qui régissent la statistique du transport.

2.2.3 Conclusion sur l'observation de l'effet de conditions aux limites sur l'écoulement

La quantification exacte de la portée d'une condition aux limites est difficile au simple vu des courbes car elles sont très accidentées. Les ordres de grandeurs sont par contre bien définis. L'amplitude de l'effet des conditions aux limites dépend de la grandeur imposée, de la grandeur observée, de la direction de la ligne sur laquelle on impose la condition, et de l'importance des fluctuations de perméabilité ainsi que le résume le tableau 2.5.

	Dirichlet (longitudinal)	Dirichlet (transverse)	Neumann (transverse)
σ_h	$\rightarrow 0$ (tout le domaine)	$\rightarrow 0$ (tout le domaine)	imposé (tout le domaine)
$\langle U_2 \rangle$	—	$\times (1 + \sigma_y^2)$ (3λ)	décroît (4λ)
σ_{u_2}	croît fortement (3λ)	croît fortement (3λ)	légère décroissance ? (3λ ?)
σ_{u_1}	$\rightarrow 0$ (2λ)	croît fortement (2λ)	$\rightarrow 0$ (3λ)

TAB. 2.5: Effet des conditions aux limites sur la charge et la vitesse suivant leur type : amplitude et entre parenthèses, portée approximative.

Les conditions aux limites déterminent sur l'ensemble du domaine et les grandeurs moyennes et le comportement stochastique de la charge et de la vitesse. Comme on peut le constater tableau 2.5, l'annulation arbitraire des fluctuations de la charge s'accompagne de la forte croissance des fluctuations d'une composante de la vitesses, et vice-versa. Comme les profils de charge et les vitesses changent suivant le type de conditions aux limites, le problème physique traité n'est pas le même. Cette étude montre que les deux problèmes n'ont pas de solutions équivalentes, même assez loin des bords.

Une prise en compte possible de ces effets serait, comme l'ont proposé Rubin et Dagan [*Rubin et Dagan 1988* ; *Rubin et Dagan 1989*], d'identifier un milieu borné à un milieu infini conditionné par les grandeurs et les supports géométriques de ses conditions aux limites. Ils ont mis en pratique cette idée pour des milieux semi-infinis et observé un bon accord des corrélations $\langle y(x)h(x') \rangle$ et $\langle h(x)h(x') \rangle$ obtenues analytiquement au voisinage de conditions aux limites de l'un des deux types cités plus haut, avec les valeurs conditionnées en milieu infini. Cette démarche, étendue à tout type de condition aux limites, donnerait une méthodologie permettant de

s'abstraire de leur effet. Des travaux ultérieurs vérifieront la validité de cette méthode sur un terrain borné.

2.2.4 Justification théorique

Le modèle linéarisé [Dagan 1989] peut être de quelque secours pour retrouver certains résultats, parmi ceux qui ont été exposés précédemment. On rappelle ici les grandes lignes nécessaires à la justification théoriques des résultats de calcul obtenus. Le milieu et l'écoulement sont supposés uniformes. On décompose chaque grandeur en sa valeur moyenne stochastique et une fluctuation. En milieu infini, les moyennes et écart-types sont donc constants dans l'espace, sauf pour la charge dont la moyenne présente un gradient constant \vec{J}_0 . Une condition aux limites le long d'une ligne droite infinie, même si elle ne modifie pas l'uniformité de l'écoulement moyen, amène une stationnarité stochastique perpendiculairement à sa direction [Rubin et Dagan 1988 ; Rubin et Dagan 1989]. C'est la façon dont les moyennes et les écart-types de charge et composantes de vitesse sont affectés par une condition de charge ou de flux le long d'une ligne infinie que nous étudions maintenant. Dans la suite, on note les vecteurs en gras, les composantes en indice, les ordres des termes d'un développement perturbatif en exposant entre parenthèses, les moyennes statistiques entre crochets $\langle \rangle$, et les fluctuations en minuscules. \vec{J}_0 est pris parallèle à l'axe 2. L'autocorrélation isotrope de log-transmissivité est choisie de forme exponentielle. On note son échelle intégrale λ .

2.2.4.1 Rappel théorique

Les variables que nous allons successivement étudier sont :

- le logarithme népérien de la transmissivité $Y = \langle Y \rangle + y$. σ_y est donné et est inférieur à l'unité. On note $K_G = e^{\langle Y \rangle}$ la moyenne géométrique de la transmissivité,
- la charge hydraulique $H = \langle H \rangle + h$.
- la vitesse de Darcy, de composantes U_1 et U_2 ; $\vec{U} = \langle \vec{U} \rangle + \vec{u}$.

En milieu infini, la stationnarité de Y fait de la charge une fonction aléatoire intrinsèque d'ordre zéro (FAI-0) [Dong 1990]. C'est-à-dire qu'elle n'est pas stationnaire, comme à l'évidence la moyenne de charge varie dans l'espace, mais son variogramme est quand-même stationnaire et défini à une constante près. En milieu infini, ce dernier tend vers l'infini lorsque la séparation tend vers l'infini. Étant donné le statut de FAI-0 pour la charge, et non de fonction aléatoire stationnaire (FAST), qu'en est-il de la nature statistique des autres variables qui en découlent, comme la vitesse de Darcy et la position particulière? Même en milieu infini, sont-elles des FAST, ou des FAI, et alors de quel ordre? La pertinence de l'usage de variogramme, et par voie de conséquence de la variance, en dépend. Cet aspect n'est pas abordé par les partisans du modèle linéarisé (Dagan, Rubin, Indelman, etc.). Pourtant, cette précision est loin d'être anodine. Si par exemple, la vitesse de Darcy est une FAI d'ordre 1, alors son variogramme est défini à des polynômes d'ordre 2 près, ce qui

laisse une large marge d'incertitude sur sa statistique, le modèle linéarisé ne fournissant qu'une solution possible parmi d'autres [Dong 1990]. Faute de démonstration mathématique *ad hoc*, on suppose, dans la suite de l'exposé, que vitesse de Darcy et position particulière sont des FAST, sans pour autant pouvoir mesurer l'impact d'une telle hypothèse. Ceci sera probablement faux au voisinage des conditions aux limites, mais espérons-le, sans conséquence notable. A titre d'illustration, lorsque Y déploie une tendance linéaire dans sa moyenne, elle est au mieux une FAI-0. Par conséquent, et toujours suivant Dong (1990), la charge est une FAI-1 : son variogramme est partiellement indéfini. Ceci limite considérablement la portée de travaux théoriques comme ceux de Rubin et Seong (1994,1999).

Développement perturbatif

Les fluctuations de charge et de vitesse tirent leur origine de la variabilité de transmissivité. On va relier l'ordre de grandeur des premières à celui de la deuxième (σ_y) en effectuant un développement perturbatif en σ_y volontairement limité au deuxième ordre :

$$\begin{aligned} Y &= Y^{(0)} + \sigma_y Y'^{(1)} &= Y^{(0)} + Y^{(1)} \\ H &= H^{(0)} + \sigma_y H'^{(1)} + \sigma_y^2 H'^{(2)} &= H^{(0)} + H^{(1)} + H^{(2)} \\ \vec{U} &= \vec{U}^{(0)} + \sigma_y \vec{U}'^{(1)} + \sigma_y^2 \vec{U}'^{(2)} &= \vec{U}^{(0)} + \vec{U}^{(1)} + \vec{U}^{(2)} \end{aligned} \quad (2.2)$$

On a bien sûr $Y^{(0)} = \langle Y \rangle$ et $Y^{(1)} = y$.

L'équation de conservation de la matière est, en supposant l'eau incompressible :

$$\operatorname{div} \vec{U} = 0 \quad (2.3)$$

On applique bien entendu la loi de Darcy :

$$\vec{U} = -e^Y \vec{\nabla} H \quad (2.4)$$

En introduisant les développements (2.2) dans (2.3) avec la loi (2.4), et en identifiant les termes de même ordre, on trouve, après avoir négligé dans les fluctuations les termes d'ordre supérieurs à 2 en σ_y , moyenné les relations et extrait les fluctuations par soustraction :

$$\langle H \rangle = H^{(0)} + \langle H^{(2)} \rangle \quad (2.5a)$$

$$h = H^{(1)} \quad (2.5b)$$

$$\langle \vec{U} \rangle = -K_G [(1 + \sigma_y^2/2) \vec{J}_0 + \langle y \vec{\nabla} h \rangle + \vec{\nabla} \langle H^{(2)} \rangle] \quad (2.5c)$$

$$u = -K_G [y \vec{J}_0 + \vec{\nabla} h] \quad (2.5d)$$

et les différents ordres de la charge vérifient :

$$\Delta H^{(0)} = 0 \quad (2.6)$$

avec les conditions aux limites du problème

$$\Delta h = -J_0 \cdot \vec{\nabla} y \quad (2.7)$$

avec les conditions aux limites appropriées sur les fluctuations

$$\Delta H^{(2)} = -\vec{\nabla} h \cdot \vec{\nabla} y \quad (2.8)$$

$H^{(2)}$ s'annulant sur les bords du domaine

Expression des corrélations

Pour obtenir les corrélations de $\langle yh \rangle$ et de $\langle hh \rangle$, on utilise la solution de l'équation (2.7). Cette solution, et la moyenne de son produit par y ou elle-même, peuvent être obtenues de diverses manières : par transformées de Fourier [Tompson et al. 1987 ; Gelhar 1993] ; ou par fonctions de Green. Dagan (1989a) effectue directement l'intégration des fonctions de Green, qui ont une forme simple pour les équations de type Poisson, mais on peut aussi simplifier l'intégration en développant les fonctions de Green en séries de Fourier, en harmoniques sphériques, ou en tenseurs cartésiens en 3D [Morse et Feshbach 1953 ; Mouche et Rouzier 1993].

Soit G la fonction de Green de l'équation formelle $\Delta f = q$ avec les conditions aux limites du problème, telle que

$$f(\vec{x}) = \int_{\vec{x}'} G(\vec{x}, \vec{x}') q(\vec{x}') d\vec{x}' \quad (2.9)$$

D'après l'équation (2.7), $-J_0 \cdot \vec{\nabla} y$ est le "terme source" q de $f = h$:

$$h(\vec{x}) = - \int_{\vec{x}'} G(\vec{x}, \vec{x}') \vec{J}_0 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}'} y(\vec{x}') d\vec{x}' \quad (2.10)$$

On en déduit la corrélation transmissivité-charge :

$$\langle y(x) h(x') \rangle = -J_0 \int_{\vec{r}} G(\vec{x}', \vec{x} + \vec{r}) \partial_{r_2} C_{yy}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.11)$$

et l'autocorrélation de charge :

$$\langle h(x) h(x') \rangle = -J_0^2 \int_{\vec{x}''} \int_{\vec{r}} G(\vec{x}, \vec{x}'') G(\vec{x}', \vec{x}'' + \vec{r}) \partial_{r_2}^2 C_{yy}(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{x}'' \quad (2.12)$$

Or, étant donné que l'autocorrélation de y vaut $C_{yy}(\vec{r}) = \langle y(\vec{x} + \vec{r}) y(\vec{x}) \rangle = \exp(-r/\lambda)$, et ne dépend par conséquent que de la norme r de \vec{r} , on remarque que $\partial_{r_2} C_{yy}(\vec{r})$ est une fonction paire suivant l'axe 1, et impaire suivant l'axe 2, et que $\partial_{r_2}^2 C_{yy}(\vec{r})$ est une fonction paire suivant les deux axes. Cette observation permet de simplifier les intégrales (2.11) et (2.12).

Enfin, en prenant la moyenne stochastique de l'équation (2.8), on trouve :

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta H^{(2)} \rangle &= -\langle \vec{\nabla} h \cdot \vec{\nabla} y \rangle \\
 &= -\text{div} \langle y \vec{\nabla} h \rangle + \langle y \Delta h \rangle \\
 &= -\text{div} \langle y \vec{\nabla} h \rangle - \vec{J}_0 \cdot \langle y \vec{\nabla} y \rangle
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Comme σ_y est supposé constant dans l'espace, le deuxième terme de la dernière égalité disparaît et il reste :

$$\langle \Delta H^{(2)} \rangle = -\text{div} \langle y \vec{\nabla} h \rangle \tag{2.14}$$

Corrélations de transmissivité et de charge en milieu infini 2D

Calculons les corrélations de charge entre le point $\vec{0}$ et le point \vec{r} , représentatifs de tout couple de points $(\vec{x}, \vec{x} + \vec{r})$.

Soit G^∞ la fonction de Green en milieu infini 2D pour l'équation $\Delta f = q$:

$$G^\infty(\vec{r}, \vec{r}') = G^\infty(|r - r'|) = \frac{1}{2\pi} \ln |r - r'| \tag{2.15}$$

Le calcul explicite de (2.11) et (2.12) avec la forme de C_{yy} choisie donne alors :

$$\langle y^{(\vec{0})} h(\vec{r}) \rangle = -\frac{\sigma_y^2}{2\lambda} (\vec{J}_0 \cdot \vec{r}) \left[\frac{\lambda}{r} - \left(\frac{\lambda}{r} + 1 \right) e^{-r/\lambda} \right] \tag{2.16}$$

en dérivant cette expression par rapport à \vec{r} , on obtient :

$$\langle y^{(\vec{0})} \vec{\nabla} h(\vec{r}) \rangle = -\frac{\sigma_y^2}{2} \vec{J}_0 \tag{2.17}$$

En en prenant la divergence et en remarquant, d'après l'équation (2.7), que $\langle y^{(\vec{0})} \Delta h(\vec{r}) \rangle = 0$, on trouve :

$$\langle \vec{\nabla} y^{(\vec{0})} \cdot \vec{\nabla} h(\vec{r}) \rangle = 0 \tag{2.18}$$

En exploitant cette dernière relation dans (2.8), on a alors :

$$\langle H^{(2)} \rangle = 0 \tag{2.19}$$

2.2.4.2 Effets d'une condition à la limite latérale de charge

Dans ce paragraphe, la charge est imposée le long d'une ligne infinie parallèle à l'écoulement. Par conséquent, les fluctuations de charge h sont nulles le long de cette ligne et l'équation (2.7) devient :

$$\begin{aligned}
 \Delta h &= -J_0 \cdot \vec{\nabla} y \\
 &\text{avec } h = 0 \text{ sur la ligne } x_1 = 0
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Sur la vitesse moyenne

Nous allons ici calculer chaque terme de l'expression (2.5c) :

$$\langle \vec{U} \rangle = -K_G [(1 + \sigma_y^2/2) \vec{J}_0 + \langle y \vec{\nabla} h \rangle + \vec{\nabla} \langle H^{(2)} \rangle]$$

La fonction de Green pour les fluctuations de charge (2.7) devient :

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = G^\infty(x_1, x_2, x'_1, x'_2) - G^\infty(x_1, x_2, -x'_1, x'_2) \quad (2.21)$$

La corrélation $\langle y h \rangle$ vaut alors :

$$\langle y(\vec{x}) h(\vec{x}') \rangle = J_0 \int_{\vec{x}''} G^\infty(\vec{x}, \vec{x}'') q(\vec{x}, \vec{x}'') d\vec{x}'' \quad (2.22)$$

le domaine d'intégration étant le plan entier, et où le terme source à utiliser dans (2.9) est

$$\begin{aligned} q(\vec{x}, \vec{x}'') &= -\partial_{x_2-x_2''} C_{yy}(x_1 - x_1'', x_2 - x_2'') & \text{si } x_1'' \geq 0 \\ q(\vec{x}, \vec{x}'') &= +\partial_{x_2-x_2''} C_{yy}(x_1 + x_1'', x_2 - x_2'') & \text{si } x_1'' \leq 0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

ou en écriture compacte

$$q(\vec{x}, \vec{x}'') = -\text{sign}(x_1'') \partial_{x_2-x_2''} C_{yy}(x_1 - |x_1''|, x_2 - x_2'') \quad (2.24)$$

Le caractère essentiel de $q(\vec{x}, \vec{x}'')$ est son imparité par rapport à la droite $x_1'' = 0$ quand $x_1 = 0$, et par rapport à la droite $x_2'' = x_2$. La fonction de Green $G^\infty(\vec{x}', \vec{x}'')$ en milieu infini est quant à elle paire par rapport aux droites $x_1'' = x_1'$, et $x_2'' = x_2'$.

Ainsi, quand $x_2' = x_2$, l'intégrale (2.22) suivant la coordonnée x_2'' est nulle. On a alors :

$$\forall x_1, x_1', \langle y(x_1, x_2) h(x_1', x_2) \rangle = 0 \quad (2.25)$$

En dérivant cette égalité par rapport à x_1' , et en faisant tendre x_1' vers x_1 , on arrive à :

$$\forall x_1, x_2, \langle y(x_1, x_2) \partial_{x_1} h(x_1, x_2) \rangle = 0 \quad (2.26)$$

De plus, h étant nul le long de la ligne de charge imposée en $x_1 = 0$, on a $\partial_{x_2} h(0, x_2) = 0$ quel que soit x_2 , et donc

$$\forall x_2, \langle y(0, x_2) \partial_{x_2} h(0, x_2) \rangle = 0 \quad (2.27)$$

(2.26) et (2.27) mises ensemble donnent la valeur du deuxième terme de l'expression (2.5c) sur la condition à la limite considérée :

$$\forall x_2, \langle y \vec{\nabla} h \rangle(0, x_2) = 0 \quad (2.28)$$

Pour terminer d'évaluer l'impact sur la vitesse moyenne de la condition à la limite de charge latérales, estimons maintenant le troisième terme de l'expression (2.5c) :

$H^{(2)}$ s'annulant sur les conditions aux limites, on a immédiatement

$$\langle H^{(2)} \rangle(0, x_2) = 0 \quad \text{et} \quad \partial_{x_2} \langle H^{(2)} \rangle(0, x_2) = 0 \quad (2.29)$$

Des expressions (2.2)c, (2.28) et (2.29), on déduit la vitesse moyenne sur la droite de charge imposée :

$$\langle U_2(0, x_2) \rangle = -K_G (1 + \sigma_y^2/2) J_0 \quad (2.30)$$

De plus, ayant naturellement $\langle U_1 \rangle = 0$ en tout point, puisque l'écoulement moyen transverse reste nul, on peut écrire

$$\boxed{\langle \vec{U}(0, x_2) \rangle = (1 + \sigma_y^2/2) \langle \vec{U}^\infty \rangle} \quad (2.31)$$

Sur les fluctuations de vitesse

Du fait de la nature de la condition à la limite que nous traitons ici, $h(0, x_2) = 0$.

De l'équation (2.2)d, on déduit qu'alors

$$u_1(0, x_2) = -K_G \partial_1 h(0, x_2) \quad (2.32)$$

$$u_2(0, x_2) = -K_G y J_0 = y U^{(0)} \quad (2.33)$$

Les écart-types de vitesse valent donc :

$$\boxed{\begin{cases} \sigma_{u_1}(0, x_2) &= K_G \langle (\partial_1 h)^2 \rangle^{1/2}(0, x_2) \\ \sigma_{u_2}(0, x_2) &= \sigma_y U^{(0)} \end{cases}} \quad (2.34)$$

Étant donné sa complexité, le calcul de la variance du gradient transverse de charge $\langle (\partial_1 h)^2 \rangle$ n'a pas été mené.

Le tableau 2.6 donne les coefficients par lesquels sont multipliés les moyennes et écart-types de vitesse à l'approche d'une condition de charge. Ces valeurs numériques sont les moyennes arithmétiques des valeurs obtenues par simulation au point milieu de chaque bord latéral. L'estimation de l'accroissement de la moyenne de vitesse longitudinale est très satisfaisant (sauf aux fortes hétérogénéités où, de toute façon, le modèle linéarisé n'est plus valide), mais on observe une diminution imprévue de son écart-type, qui bénéficie manifestement d'une terme du second ordre en σ_y . La précision de l'estimation numérique peut bien sûr être invoquée, mais il est probable que l'effet d'une condition de charge ne s'en tienne pas aux termes linéaires des développements perturbatifs.

σ_y	$\langle U_2 \rangle / U^{(0)}$		$\sigma_{u_2} / \sigma_y U^{(0)}$		$\sigma_{u_1} / \sigma_y U^{(0)}$
	QQHH	HHHH	QQHH	HHHH	QQHH
0,1	1,01	—	1	0,75	0,65
0,5	1,12	1,12	1	0,78	0,80
1,0	1,50	1,54	1	0,85	1,25
1,5	2,12	2,62	1	0,93	2,68

TAB. 2.6: Facteur multiplicatif d'amplitude observé numériquement et valeur prévue par le modèle linéarisé, pour les moyennes et écart-types de vitesse au voisinage de conditions aux limites latérales de charge. On ne dispose pas d'estimation mathématique de $\sigma_{u_1} / \sigma_y U^{(0)}$, et on n'a pas fait figurer $\langle U_1 \rangle / U^{(0)}$ qui vaut zéro.

2.2.4.3 Effets d'une condition à la limite latérale de flux

Dans ce paragraphe, la dérivée transverse de charge est imposée le long d'une ligne infinie parallèle à l'écoulement. L'équation (2.7) sur les fluctuations de charges devient :

$$\Delta h = -J_0 \cdot \vec{\nabla} y \quad (2.35)$$

avec $\partial_1 h = 0$ sur la ligne $x_1 = 0$

Sur la vitesse moyenne

La fonction de Green pour les fluctuations de charge (2.7) devient :

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = G^\infty(x_1, x_2, x'_1, x'_2) + G^\infty(x_1, x_2, -x'_1, x'_2) \quad (2.36)$$

Le problème est formellement similaire à celui d'une charge imposée. On utilise à nouveau l'équation (2.22), mais avec

$$q(\vec{x}, \vec{x}'') = -\partial_{x_2 - x_2''} C_{yy}(x_1 - |x_1''|, x_2 - x_2'') \quad (2.37)$$

qui est toujours impair par rapport à la droite $x_2'' = x_2$, mais pair par rapport à la droite $x_1'' = 0$ quand $x_1 = 0$. Les équations (2.25) et (2.26) sont donc encore valides. Par contre, quand $x_1 = 0$, on retrouve l'expression de la covariance log-transmissivité/charge en milieu infini (2.11). L'équation (2.17) est donc encore applicable, et mise avec (2.26), on obtient l'expression vectorielle :

$$\forall x_2, \langle y \vec{\nabla} h \rangle(0, x_2) = -\frac{\sigma_y^2}{2} \vec{J}_0 \quad (2.38)$$

L'équation (2.14) débouche alors à nouveau sur l'équation (2.29) qui signifie que la moyenne de charge à l'ordre 2 des fluctuations de transmissivité est nulle aussi

sur une ligne de flux imposé. L'équation (2.5c) donne enfin la moyenne de la vitesse longitudinale sur cette ligne :

$$\langle U_2(0, x_2) \rangle = -K_G J_0 \quad (2.39)$$

soit :

$$\boxed{\langle \vec{U}(0, x_2) \rangle = \langle \vec{U}^\infty \rangle} \quad (2.40)$$

L'application à l'ordre 2 du modèle linéarisé prouve donc, en concordance avec les résultats numériques montrant une faible diminution de la vitesse moyenne longitudinale (Fig. 2.6(b)), que la vitesse moyenne reste peu affectée par une condition latérale de flux.

Sur les fluctuations de vitesse

En ce qui concerne les fluctuations de vitesse, on a immédiatement $u_1(0, x_2) = 0$ pour tout x_2 , et donc

$$\boxed{\sigma_{u_1}(0, x_2) = 0} \quad (2.41)$$

résultat parfaitement illustré par les simulations numériques (Fig 2.8(a)) montrant comment la variance de vitesse transverse s'annule en $x_1 = 0$.

Pour le calcul de la variance de vitesse longitudinale, il faut exploiter (2.2)d :

$$u_2 = -yU^{(0)} - K_G \partial_2 h \quad (2.42)$$

Donc

$$\sigma_{u_2}^2 = \sigma_y^2 U^{(0)2} + K_G^2 \langle (\partial_2 h)^2 \rangle + 2K_G U^{(0)} \langle y \partial_2 h \rangle \quad (2.43)$$

En tenant compte de (2.38), on obtient :

$$\boxed{\sigma_{u_2}(0, x_2) = K_G \langle (\partial_2 h)^2 \rangle^{1/2}(0, x_2)} \quad (2.44)$$

Le calcul analytique de cette dernière grandeur n'a pas été effectué car la double dérivation de [Rubin et Dagan 1989, éq. (6)] est extrêmement fastidieuse.

2.2.4.4 Effet d'une condition aux limites longitudinale de charge

On se contente ici, par une démarche simple basée sur les symétries du problème, d'accéder aux premiers moments de la vitesse de Darcy.

La fonction de Green pour les fluctuations de charge (2.7) est :

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = G^\infty(x_1, x_2, x'_1, x'_2) - G^\infty(x_1, x_2, x'_1, -x'_2) \quad (2.45)$$

Là encore, nous appliquons l'équation (2.22) avec le "terme source"

$$q(x, x'') = -\text{sign}(x_2'') \partial_{x_2 - |x_2''|} C_{yy}(x_1 - x_1'', x_2 - |x_2''|) \quad (2.46)$$

qui est pair par rapport à la droite $x_1'' = x_1$, et impair par rapport à la droite $x_2'' = 0$ quand $x_2 = 0$. Il n'y a pas de symétrie particulière suivant l'axe 1 permettant de simplifier le calcul de $\langle y \partial_2 h \rangle(x_1, x_2)$, et donc d'obtenir simplement $H^{(2)}$. On connaît par contre bien $\langle y \partial_2 h \rangle(x_1, 0)$, puisque, lorsque $x_2 = 0$, on retrouve la solution en milieu infini (2.17) :

$$\forall x_1, \langle y \vec{\nabla} h \rangle(x_1, 0) = -\frac{\sigma_y^2}{2} \vec{J}_0 \quad (2.47)$$

Sur les fluctuations de vitesse

L'expression (2.2)d appliquée sur la ligne de charge imposée donne :

$$\begin{cases} u_1(x_1, 0) &= 0 \\ u_2(x_1, 0) &= -K_G (y J_0 + \partial_{x_2} h) \end{cases} \quad (2.48)$$

d'où les écart-types de vitesse, au voisinage immédiat de la ligne de charge imposée :

$$\boxed{\begin{cases} \sigma_{u_1}(x_1, 0) &= 0 \\ \sigma_{u_2}(x_1, 0) &= K_G \langle (\partial_2 h)^2 \rangle^{1/2}(x_1, 0) \end{cases}} \quad (2.49)$$

Le calcul de la variance du gradient longitudinal de charge n'a pas été conduit. On peut cependant l'obtenir en dérivant deux fois [Rubin et Dagan 1988, éq. (10)].

On observe bien Fig. 2.7(b) l'annulation de l'écart-type de la vitesse transverse sur la ligne de charge imposée perpendiculaire à l'écoulement moyen.

2.2.4.5 Conclusion sur l'étude analytique de l'effet de conditions aux limites

Le modèle présenté ici, bâti autour du modèle linéarisé en prenant une seule ligne de flux ou de charge imposée à la fois, explique une partie des résultats observés. Dans leurs travaux, Rubin et Dagan ont développé les formules analytiques des covariances C_{yh} et C_{hh} au voisinage de certaines conditions aux limites. La complexité des calculs à mener pour en déduire la structure de corrélation de la vitesse dissuade de traiter la question de l'influence des conditions aux limites dans toute sa généralité, et incite à explorer une autre voie. La méthode présentée ici repose sur l'exploitation de symétries spatiales engendrées par la forme des fonctions de Green correspondant aux problèmes avec conditions aux limites. Elle ne permet de calculer que les valeurs sur une ligne de charge ou de flux imposé des grandeurs bénéficiant d'une symétrie particulière. Les indications données par le modèle sont alors satisfaisantes, mais incomplètes :

(i) La vitesse moyenne est correctement prédite lorsque la ligne supportant la condition aux limites est parallèle à l'écoulement. Elle n'est pas accessible simplement si cette ligne est perpendiculaire à l'écoulement.

- (ii) On observe bien une annulation des écart-types de vitesse lorsque le modèle le prédit.
- (iii) Dans les autres cas, lorsqu'une variance de vitesse ne s'annule pas sur la ligne de flux ou de charge imposée, on remarque l'effet des termes d'ordre supérieur dans le développement perturbatif des fluctuations de vitesse, dont le modèle linéarisé ne tient pas compte.

2.3 Impact sur le transport de conditions aux limites déterministes

Le transport de particule, et plus précisément le rôle des hétérogénéités de transmissivité sur la dispersion, est conduit par les covariances de fluctuation de vitesse lagrangienne $\langle u_i u_j \rangle(r)$ [Dagan 1989 ; Gelhar 1993]. Le transport supporte donc indirectement l'effet des conditions aux limites sur les vitesses. L'étude précédente ne permet pas de parvenir à des conclusions sur le transport car nous n'avons étudié que les covariances de vitesse à séparation nulle $\langle u_i u_j \rangle(0)$. Aussi s'appuie-t-on sur les simulations de lâcher de particules pour comprendre comment les dispersions sont affectées par les conditions aux limites. Notons que la vitesse lagrangienne d'une particule peut différer significativement de la vitesse de Darcy, ne serait-ce qu'en raison de la porosité, mais aussi par l'hétérogénéité de la vitesse de l'eau au sein des pores, ou tout processus réactif déviant le transport d'une particule de la pure convection, ainsi que sous l'effet de la déformation du milieu poreux. On suppose dans cet exposé que la porosité est homogène et vaut 1, que le milieu est indéformable, que le traceur est conservatif, et que la micro-dispersion est négligeable (non prise en compte). De la sorte, on peut confondre vitesse lagrangienne et vitesse eulérienne.

L'impact des conditions imposées sur les bords amont et aval se combine avec celui de conditions imposées sur les bords latéraux, de sorte qu'il est difficile d'attribuer à l'un ou à l'autre un effet particulier, comme c'était le cas dans le paragraphe 2.2. Afin d'isoler l'impact particulier d'un type de condition à la limite imposée sur deux bords parallèles, les dispersions ont été calculées par simulation avec les quatre types de conditions aux limites possibles. Chacun de ces jeux de conditions aux limites s'approche plus ou moins d'une situation réelle simplifiées :

- un aquifère cerné par des rivières subit des conditions aux limites de charge sur tout son pourtour (HHHH),
- un aquifère saturé affleurant à deux de ses extrémités, et bordé ailleurs par des matériaux imperméables ou des plans de symétrie, correspond à des charges imposées (égales aux cotes) en amont et en aval et à des flux latéraux nuls (QQHH),
- Les conditions aux limites en flux imposés en amont et en aval se rapprochent d'une expérience de traçage en dipôle à débit imposé. Les conditions aux limites latérales sont celles de l'aquifère, et donc, suivant le contexte, charge (HHQQ) ou flux imposé (QQQQ).

Les simulations donnant les dispersivités en fonction de l'abscisse curviligne moyenne sont obtenues sur un maillage carré $17\lambda \times 17\lambda$, plus large que celui utilisé précédemment lors de l'étude des variables de l'écoulement. Après avoir revu rapidement dans une première partie les bases mathématiques concernant le transport dans le cadre du modèle linéarisé, on présente les résultats de simulation en séparant les variances de position longitudinale et transverse.

2.3.1 Rappel des résultats du modèle linéarisé

L'interprétation des résultats de simulation fait appel à des connaissances relatives à la description théorique de la dispersion. En voici les bases [Dagan 1989] :

Considérons un champ de vitesse aléatoire dont les deux premiers moments sont stationnaires, c'est-à-dire :

$$\langle U(\vec{x}) \rangle = \vec{U}_0 = \text{constante} \quad (2.50)$$

$$\langle u_i(\vec{x}) u_j(\vec{x}') \rangle = \langle u_i u_j \rangle (\vec{x}' - \vec{x}) \quad (2.51)$$

où \vec{x} et \vec{x}' sont deux points quelconques de l'espace.

Lâchons une particule à $t = t_0$ en \vec{X}_0 dans ce champ de vitesse. La position de chaque point de la trajectoire suivie s'obtient par :

$$\vec{X}(t) = \vec{X}_0 + \int_{t_0}^t \vec{U}[\vec{X}(t')] dt' \quad (2.52)$$

Ceci donne, en séparant moyenne et fluctuations :

$$\langle \vec{X}(t) \rangle = \vec{X}_0 + \vec{U}_0 t \quad (2.53)$$

$$\vec{x}(t) = \int_{t_0}^t \vec{u}[\vec{X}(t')] dt' \quad (2.54)$$

La variance de position s'en déduit :

$$\langle x_i(t) x_j(t) \rangle = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \langle u_i[\vec{X}(t')] u_j[\vec{X}(t'')] \rangle dt' dt'' \quad (2.55)$$

Si les fluctuations de position sont petites devant la longueur caractéristique des variations de fluctuation de vitesse (quelques longueurs de corrélation), on peut s'arrêter au premier ordre du développement de Taylor :

$$u_i(\vec{x}) = u_i(\langle \vec{X} \rangle) + \vec{\nabla} u_i \cdot \vec{x} \quad (2.56)$$

Une telle écriture ne s'applique donc qu'à proximité du point de lâcher et pour des hétérogénéités de milieu relativement faibles. L'approximation de Dagan consiste

à ignorer le terme d'ordre 2 en fluctuation dans l'égalité ci-dessus ; autrement dit à évaluer les fluctuations de vitesse au point moyen. Les dispersions X_{ij} s'écrivent alors :

$$X_{ij}(t) = \langle x_i(t) x_j(t) \rangle = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \langle u_i[\langle \vec{X}(t') \rangle] u_j[\langle \vec{X}(t'') \rangle] \rangle dt' dt'' \quad (2.57)$$

En utilisant les abscisses curvilignes le long de la trajectoire moyenne, dont la définition est :

$$ds = \|\langle U[\langle \vec{X}(t) \rangle] \rangle\| dt \quad (2.58)$$

il y a alors équivalence entre le temps et l'abscisse curviligne pour le repérage d'un point sur la trajectoire moyenne. On obtient alors :

$$X_{ij}(s) = \int_0^s \int_0^s \frac{\langle u_i[\langle \vec{X}(s') \rangle] u_j[\langle \vec{X}(s'') \rangle] \rangle}{\|\langle U[\langle \vec{X}(s') \rangle] \rangle\| \cdot \|\langle U[\langle \vec{X}(s'') \rangle] \rangle\|} ds' ds'' \quad (2.59)$$

Ceci se simplifie quand l'écoulement est uniforme en :

$$X_{ij}(s) = \int_0^s \int_0^s \frac{\langle u_i u_j \rangle_{s'-s''}}{U_0^2} ds' ds'' \quad (2.60)$$

Les dispersions sont donc indépendantes de la norme de la vitesse moyenne, puisque les fluctuations de vitesse lui sont a priori proportionnelles. Les dispersions dépendent de la position moyenne du panache plutôt que du temps. Dans ce cadre particulier d'écoulement uniforme, il est aisé de définir le tenseur de dispersivité :

$$\alpha_{ij}(s) = \int_0^s \frac{\langle u_i u_j \rangle_{s-s'}}{U_0^2} ds' \quad (2.61)$$

on démontre alors facilement que :

$$X_{ij}(s) = 2 \int_0^s \alpha_{ij}(s') ds' \quad \text{ou} \quad \alpha_{ij} = \frac{1}{2} \frac{dX_{ij}}{ds} \quad (2.62)$$

2.3.2 Influence des conditions aux limites sur la variance de position longitudinale

Dans cette partie et la suivante, les simulations parcourent chaque type de condition aux limites, sur un domaine carré de côté 17λ , d'écart-type de transmissivité égale à 0,1 et 1 ; la particule est lâchée à 3λ du bord amont. 1500 réalisations ont été générées dans les cas HHHH et QQHH, 600 seulement dans les cas HHQQ et QQQQ. Une étude statistique permet d'extraire à chaque instant la position moyenne et les variances de position du panache. On présente ici l'étude de la variance de position en fonction de l'abscisse curviligne le long de la trajectoire moyenne analytique.

L'examen des résultats de simulations réalisées à $\sigma_y = 1$ (Cf. Fig. 2.9(c)) montre que la dispersion longitudinale est indépendante des conditions aux limites latérales.

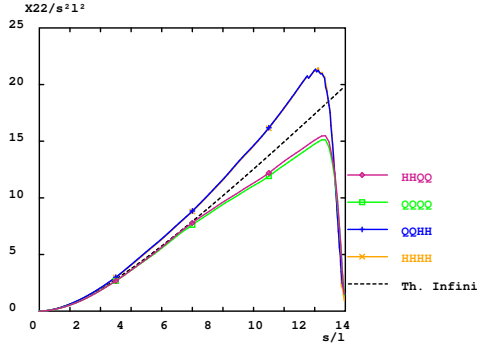
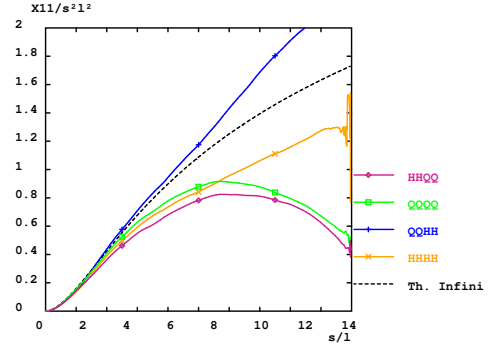
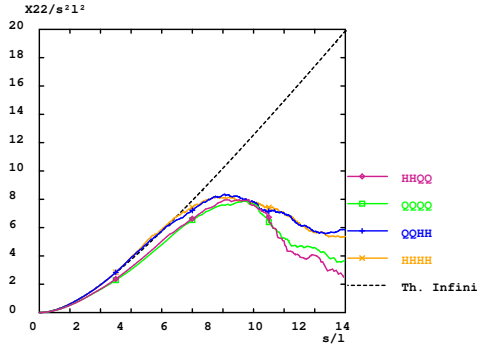
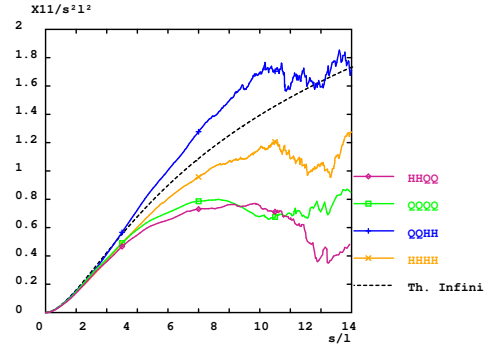
(a) $X_{22}, \sigma_y = 0, 1$ (b) $X_{11}, \sigma_y = 0, 1$ (c) $X_{22}, \sigma_y = 1$ (d) $X_{11}, \sigma_y = 1$

FIG. 2.9: Évolution de l'étalement longitudinal X_{22} (à gauche) et transverse X_{11} (à droite) d'un panache sous l'effet de différentes conditions aux limites pour deux niveaux d'hétérogénéité σ_y (haut et bas). Les variances de positions ont été normalisées par $\sigma_y^2 \lambda^2$, et l'abscisse curviligne s a été normalisée par λ .

De plus, l'accord est excellent avec le modèle de Dagan tant que l'on impose des charges en amont et en aval. Enfin, lorsque les flux sont imposés sur les bords amont et aval, la dispersion longitudinale est significativement plus faible que la prévision du modèle linéarisé. Ce dernier point amène deux réflexions :

1. L'annulation des fluctuations de vitesse longitudinale en amont et en aval a une incidence directe sur la dispersion longitudinale.
2. L'écart entre les simulations à flux amont et aval imposés et la prédiction continue de s'accroître bien au-delà de la portée estimée des conditions aux limites sur la variance de vitesse longitudinale. On peut avancer deux explications :
 - les corrélations de vitesses sont affectées sur de courtes distances par les conditions aux limites, mais la proximité du point de lâcher à celles-ci entache la dispersivité longitudinale d'une erreur. Cette erreur atteint une valeur constante au-delà de la portée d'affectation des corrélations de vitesse par les conditions aux limites. Ainsi, la dispersion longitudinale comporterait une erreur s'accroissant linéairement avec la distance de parcours. Pourtant,

la dispersion longitudinale observée par simulation ne dépend pas de la distance de lâcher, pourvu qu'elle vaille au moins 3λ , ainsi que le prouve la Fig. 2.10.

- les corrélations de vitesse longitudinale sont affectées sur de longues distances par les conditions aux limites. Il n'y a alors pas de distance de lâcher à partir de laquelle la dispersion longitudinale n'est plus influencée par les conditions aux limites amont et aval de flux.

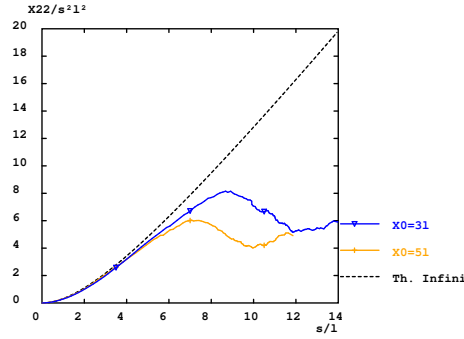


FIG. 2.10: Impact sur l'étalement longitudinal X_{22} d'un panache de la proximité du point de lâcher au bord amont (cas QQHH). Les variances de positions ont été normalisées par $\sigma_y^2 \lambda^2$, et l'abscisse curviligne s a été normalisée par λ .

Lorsque $\sigma_y = 0,1$, les dispersions longitudinales (Cf. Fig. 2.9(a)) simulées avec charges longitudinales imposées (QQHH et HHHH superposées) ne concordent plus avec la prédiction du modèle linéarisé, alors que celles simulées avec flux longitudinaux imposés (HHQQ et QQQQ) semblent donner de meilleurs résultats jusqu'à 7λ de parcours moyen. La raison de cet apparent changement de comportement réside dans la précision du calcul numérique. En effet, l'étalement longitudinal caractéristique du panache (X_{22}) vaut environ $0,05 \lambda$, soit $1/5$ de maille, après un déplacement moyen de 5λ . Au vu de cette sous-discrétisation manifeste, on comprend que la simulation surestime l'étalement. Il est même remarquable que des distances aussi petites par rapport à la taille d'une maille soient encore relativement bien prises en compte et que de nettes tendances se dégagent. Quant à la dispersion longitudinale obtenue avec des flux longitudinaux imposés, elle est toujours inférieure à celle obtenue en imposant les charges, et dans un même rapport qu'avec $\sigma_y = 1$. Ainsi ces simulations à faible σ_y ne contredisent pas celles réalisées avec $\sigma_y = 1$, et mettent en valeur l'effet de la sous-discrétisation du champ de vitesse.

2.3.3 Influence des conditions aux limites sur la variance de position transverse

On voit nettement Fig. 2.9(b) et Fig. 2.9(d) pour $\sigma_y = 0,1$ et 1 respectivement l'effet combiné des conditions latérales et longitudinales sur la dispersion transverse.

Des conditions aux limites latérales de flux engendrent une dispersion transverse plus élevée qu'avec des conditions latérales de charge. Lorsque les charges sont imposées en amont et en aval, le modèle linéarisé sous-estime X_{11} lorsque les bords latéraux sont imperméables, et surestime X_{11} lorsque la charge y est fixée. Cet effet est d'autant plus marqué que le domaine est étroit (Fig. 2.11(a) et 2.11(b)) les dispersions transverses à différentes valeurs de σ_y sur le domaine $21\lambda \times 13\lambda$.

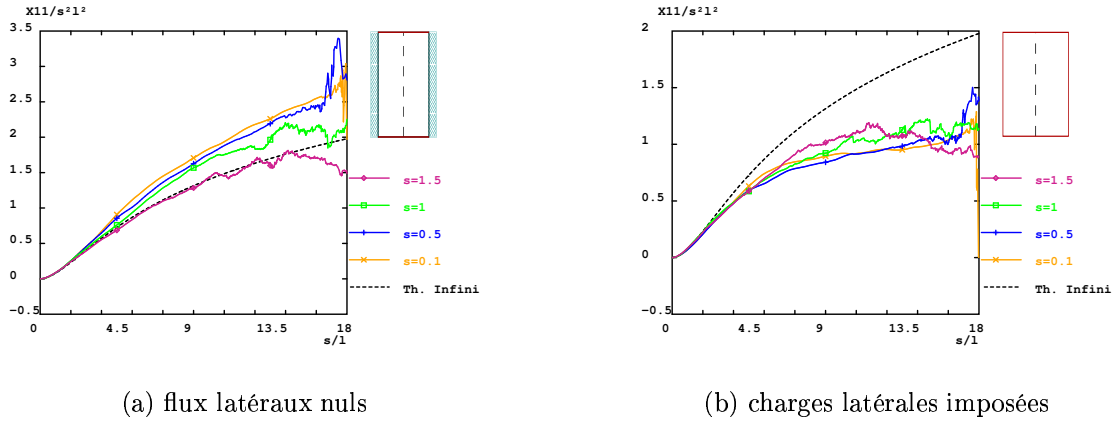


FIG. 2.11: Évolution de l'étalement transverse X_{11} d'un panache en fonction du niveau d'hétérogénéité σ_y suivant le type de conditions aux limites transverses. Les variances de positions ont été normalisées par $\sigma_y^2 \lambda^2$, et l'abscisse curviligne s a été normalisée par λ .

L'influence de flux imposés en amont et en aval sur la dispersion transverse est considérable. Quelles que soient les conditions imposées sur les bords latéraux, X_{11} est alors très inférieure à la prédiction du modèle milieu infini, et affiche même une tendance à la reconcentration à l'approche du bord aval. Cet effet est très net lorsque l'écart-type de transmissivité vaut 0,1 (Fig. 2.9(c)), cette valeur de σ_y étant suffisamment faible pour que les résultats de simulations soient encore fiables près de la frontière aval. La sous-discrétisation du champ de vitesse ne peut en aucun cas expliquer la forme de la dispersion transverse observée.

2.3.4 Conclusion sur l'influence des conditions aux limites sur le transport

Il est maintenant clair que la dispersion d'un panache suscitée par les hétérogénéités de transmissivité d'un milieu dépend de la nature des conditions aux limites qui y génèrent l'écoulement. Bien que l'on puisse obtenir un écoulement moyen donné indifféremment avec des conditions aux limites de type Neumann ou Dirichlet, les implications au niveau des variabilités de vitesse sont très différentes (Voir §2.2.2). Elles se répercutent de façon sensible sur le transport de particule, dont

la variabilité (c'est-à-dire l'étalement d'un panache) repose sur la structure de corrélation de la vitesse de Darcy. La dispersion longitudinale n'est sensible qu'aux conditions aux limites longitudinales. Lorsque ce sont des conditions de charge, les simulations et les prédictions du modèle linéarisé concordent. La dispersion transverse est très sensible au type de conditions aux limites imposées, aussi bien longitudinales que latérales. Remarquons en particulier que des conditions latérales de charge diminuent la dispersion transverse, alors que des conditions latérales de flux l'augmentent.

La portée des conditions aux limites est surprenante. Bien que les panaches paraissent à distance respectable des bords (5, 7 ou 8λ quand $\sigma_y = 0,5$ pour différentes dimensions du domaine), les dispersions sont tout de même affectées, y compris lorsque le panache a des dimensions très réduites et qu'il se trouve à une dizaine de longueurs de corrélation des bords. L'effet des conditions aux limites latérales ne s'estompe que très lentement pour ce qui est de la dispersion longitudinale (Cf. Fig. 2.12(a)), et subsiste sans décliner lorsqu'il s'agit de la dispersion transverse (Cf. Fig. 2.12(b)).

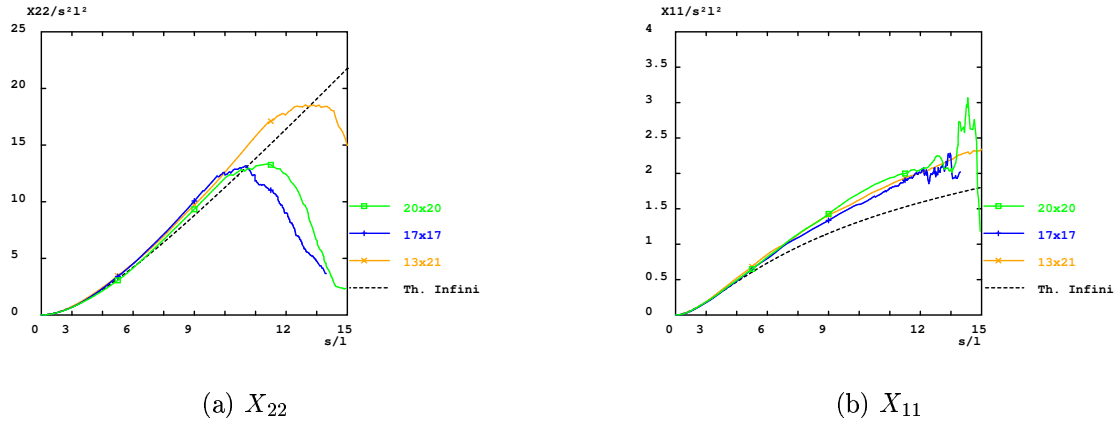


FIG. 2.12: Étalement longitudinal X_{22} (à gauche) et transversal X_{11} (à droite) d'un panache en fonction de l'éloignement des conditions aux limites résultant de la taille du domaine considéré, pour un point de lâcher toujours à 3λ du bord amont (cas QQHH). Les variances de positions ont été normalisées par $\sigma_y^2 \lambda^2$, et l'abscisse curviligne s a été normalisée par λ .

Il y a une apparente contradiction entre ce que l'on connaît du comportement de la vitesse au voisinage des conditions aux limites, et ce que l'on observe pour le transport :

- Le §2.2.2 a montré que les variances de vitesse étaient affectées sur une distance des bords relativement faible (3 à 4λ du bord), et le transport est affecté à des distances plus grandes.
- En imposant la charge sur les bords latéraux, la variance de vitesse transverse augmente mais la dispersion transverse diminue ; et inversement, en imposant des

flux sur ces mêmes bords, la variance de vitesse transverse s'annule mais la dispersion transverse augmente.

Pour lever cette ambiguïté, il faut se rappeler que la structure de corrélation d'une grandeur est affaire à la fois d'amplitude (la variance) et de portée (la longueur de corrélation). Les résultats obtenus jusqu'ici semblent prouver que les dispersions sont moins dépendantes des variations de variances de vitesse - qui s'essouffent après peu de λ_Y , hors d'atteinte des particules - que des variations de la portée des corrélations de vitesse λ_U engendrées par la présence d'une condition à la limite. Ainsi, la portée longitudinale λ_{2,U_1} des corrélations de vitesse transverse décroîtrait à l'approche d'une condition latérale de charge, et augmenterait à l'approche d'une condition latérale de flux; et la portée de cette influence serait grande (au moins une dizaine de λ_Y). En l'absence de démonstration théorique, on peut s'en tenir à cette interprétation.

Conclusion

Ce travail a exploré l'impact en deux dimensions de différentes conditions aux limites sur l'écoulement et le transport, dans le cas d'un écoulement uniforme dans une boîte rectangulaire.

L'étude de l'impact de conditions de charge imposée ou de flux nuls a été menée analytiquement, aussi loin qu'il était raisonnablement possible. La dérivation d'expressions analytiques s'avère vite extrêmement lourde. C'est pourquoi on s'en est tenu à l'exploitation de la seule symétrie des problèmes, ce qui, dans certains cas, donne des résultats éclairants, corroborés par les résultats de simulation. Le modèle linéarisé a rencontré quelques succès : dans les cas analytiquement évidents comme l'annulation, au voisinage de sa condition à la limite, de la variance de la variable imposée; ou l'estimation de la vitesse moyenne lorsqu'elle est parallèle à la condition à la limite; ou encore l'estimation de variance de charge lorsqu'elle est imposée en amont ou en aval. Cependant, il a montré des faiblesses, car, à la complexité rapidement croissante des calculs s'ajoute l'hypothèse limitative de petites hétérogénéités, du fait de l'omission de termes d'ordre deux ou supérieurs. On pourrait, pour circonvenir cette difficulté, faire comme l'ont suggéré Dagan et Rubin, identifier un milieu borné à un milieu infini conditionné par les grandeurs et les supports géométriques de ses conditions aux limites. Il est en effet beaucoup plus facile d'estimer des corrélations en milieu infini et de s'en servir dans un conditionnement bayésien, que de prendre en compte explicitement une condition à la limite dans l'estimation de corrélations. Notons toutefois que cette dernière démarche repose sur l'écriture des corrélations $\langle yh \rangle$ et $\langle hh \rangle$, aisée en écoulement uniforme, mais autrement problématique dans les autres cas.

La voie de la simulation de Monte-Carlo s'est imposée, car elle intègre toutes les

interactions implicitement. Mais elle a ses propres limites. Lors du dépouillement des résultats de simulation, il s'est avéré délicat de discriminer les effets de chaque condition à la limite tant ils se combinent au sein d'une même simulation. Leur contingence même est de requérir des conditions sur tous les bords. Il n'était ainsi pas toujours possible, compte tenu des moyens de calcul disponibles, de s'appuyer sur une grille suffisamment étendue, et discrétisée suffisamment finement. On a toutefois pu mettre en évidence des effets importants et à courte portée sur la moyenne et les fluctuations de vitesse de Darcy. Trois à quatre longueurs de corrélation de perméabilité suffisent pour que ces effets s'estompent. Il ne faut cependant pas généraliser cette observation trop vite. En effet, la charge est affectée par des conditions aux limites sur une portée infinie, ce qui est de mauvais augure pour l'interprétation de données de charge mesurée dans des aquifères confinés, puisqu'il faut ainsi tenir compte de la distance et de la nature de ses sollicitations loin des points de mesure. De plus, l'étalement d'un panache de polluant semble fortement influencé par la présence de conditions aux limites, même au-delà des 3 ou 5 λ classiquement envisagés, particulièrement la dispersion transverse, mais aussi la dispersion longitudinale en présence de conditions de flux amont et aval. Il semblerait que la structure de corrélation de vitesse soit influencée sur une portée beaucoup plus grande que ses simples moyenne et variances. Là encore, ceci a des implications concrètes importantes car la dispersion transverse est importante dans la dilution des polluants. Son augmentation ou sa diminution en fonction du contexte hydrologique devraient être prise en compte dans les scénarios de pollution ou de dépollution tout comme dans l'interprétation de mesures de concentration.

Enfin, il faut garder à l'esprit que ce travail concerne des écoulements bidimensionnels dont la connectivité spatiale est bien moindre qu'en trois dimensions. En effet, la fonction de Green pour la diffusion 2D est logarithmique, donc à portée infinie ; alors qu'en trois dimensions, elle est hyperbolique, donc décroissant très rapidement. Proche de pompages ponctuels ou dans des situations d'échange hydrogéologiques complexes et véritablement 3D, il est possible que la connectivité spatiale compense rapidement le déterminisme induit par des conditions aux limites imposées.

Chapitre 3

Dispersivité en milieu poreux en écoulement non uniforme

Résumé

L'écoulement et le transport de polluant dans des aquifères hétérogènes stationnaires ont été étudiés dans le cas d'écoulements tournants ou au voisinage de puits. L'hypothèse d'écoulement uniforme est très contraignante dans l'application du modèle stochastique linéarisé, qui est limité aux petites perturbations. Ce modèle a été prolongé en prenant en compte des perturbations liées à la non uniformité de l'écoulement, en particulier en intégrant dans l'équation de transport lagrangienne la contribution du gradient de vitesse moyenne. Les simulations de Monte-Carlo montrent que la charge et la vitesse sont bien décrites par l'ordre zéro de la séparation d'échelle – au moins pour leur moyenne et leur variance –, et les moments de position par l'ordre 1, sauf dans les régions de forte non-uniformité. Ceci appuie l'hypothèse selon laquelle les covariances normalisées de vitesse sont stationnaires. La dispersivité semble donc dépendre à la fois des caractéristiques stochastiques du milieu support et de la structure de l'écoulement. En conséquence, l'application à des modélisations de sites de dispersivités obtenues à partir d'interprétation de tests de pompage doit se faire avec prudence. Pourtant, la statistique de temps d'arrivée estimée en prenant un écoulement uniforme équivalent s'accorde très bien avec les temps d'arrivée observés lors de simulations de pompages simples. On peut ainsi valablement interpréter la dispersivité longitudinale extraite - sous hypothèse d'écoulement uniforme - de courbes de restitution de ce type.

Introduction

Comme on l'a vu en introduction de cette partie, la dispersivité est en rapport avec la partie gaussienne du transport du soluté seulement. Elle est en fait liée uniquement à la structure stochastique du champ de vitesse. Différentes évolutions sont ainsi à attendre dans les cas suivants :

- Le champ de vitesse est gaussien, et ses moments sont stationnaires [*Rubin 1990*],
- Le champ de vitesse est généré par un gradient de charge moyen uniforme dans un champ de perméabilité gaussien et stationnaire [*Bellin et al. 1992*]. Il n'est par

conséquent plus gaussien, spécialement pour les milieux très hétérogènes [*Grenier 1996*].

- Le champ de vitesse est généré par un gradient de charge moyen uniforme dans un champ de perméabilité gaussien instationnaire en milieu infini [*Indelman et Rubin 1996a*].
- Le champ de vitesse est généré par un gradient de charge moyen non uniforme dans un champ de perméabilité gaussien et stationnaire, comme dans le cas de recharge diffuse [*Serrano 1992*], de pompages, ou en présence de conditions aux limites (par exemple, des sources/puits en dehors de la zone d'intérêt, ou des unités hydrologiques comme des rivières, des fractures colmatées, des zones d'exfiltration, etc.).
- Tout autre cas entraînant une non-gaussianité du champ de vitesse.

La dispersivité est ainsi le fruit à la fois de la nature du milieu par la structure de son champ de perméabilité, mais est aussi fonction de de l'écoulement qui s'y produit. L'effet stochastique d'un écoulement non uniforme dans une champ de perméabilité stationnaire a été étudié du point de vue de la perméabilité effective en écoulement 2D [*Rubin et Dagan 1987* ; *Desbarats 1992* ; *Desbarats 1993* ; *Indelman et Abramovich 1994* ; *Sánchez-Vila 1997*] et 3D [*Mouche et Rouzier 1993* ; *Indelman et al. 1996b*]. Ces travaux concluent, pour l'essentiel, que la perméabilité effective est une fonction de la distance et de la nature de l'écoulement autant que des propriétés stochastiques du milieu. En dehors de cela, peu de travaux ont fait un travail similaire sur la dispersivité. Monavon a proposé une approche de la linéarisation des équations stochastiques sur la concentration par une méthode de jauges mixtes [*Monavon 1990* ; *Monavon 1993*]. Son approche est limitée, comme les précédentes, par l'hypothèse de petites perturbations de vitesse et l'hypothèse de séparation d'échelles. Elle ne peut malheureusement pas être étendue à des ordres plus élevés parce que la convergence du développement en ordres successifs n'est pas garantie.

La prise en compte de la non-uniformité de l'écoulement est particulièrement importante dans l'interprétation de tests de traçage sous pompage où la dispersivité longitudinale est fréquemment assimilée à la dispersivité asymptotique en écoulement uniforme. Ceci peut conduire à de considérables erreurs pour peu que la dispersivité obtenue de cette façon soit utilisée dans d'autres configurations d'écoulement.

Un puits de pompage à l'intérieur d'une zone d'étude, tout comme un puits d'injection, peut être considéré comme une condition à la limite de charge ou de flux tout autour du puits. Il définit un écoulement moyen dans le milieu, ainsi que les fluctuations de charge ou de flux qui, à l'évidence, dépendent de ce qui est concrètement imposé au niveau du puits (charge ou débit). On voit ainsi que le transport, à travers la structure de corrélation de la vitesse convective, devrait se comporter différemment selon la nature de la condition à la limite; et, plus généralement, la dispersion pourrait dépendre du type de conditions aux limites générant l'écoulement moyen, même si ce dernier est uniforme. Cette question, qui

a été reconnue pour son effet sur la perméabilité effective, est abordée au chapitre 2 pour un écoulement uniforme qui sera souvent appelé à titre de comparaison.

Ce chapitre étudie la dispersion d'un panache du point de vue lagrangien dans des écoulements 2D non uniformes générés par des conditions aux limites, dans un milieu dont la perméabilité est stationnaire. La première partie établit le cadre théorique, et expose l'approche de la séparation d'échelle. La seconde présente l'étude numérique de la statistique de transport (moyenne et variances de position et de temps d'arrivée) dans trois types d'écoulement :

- gradient naturel : une charge hydraulique quadratique sans recharge génère un écoulement tournant,
- écoulement forcé à l'approche d'un puits de pompage,
- écoulement forcé entre un dipôle de puits d'injection et de pompage.

Les résultats numériques sont ensuite comparés aux modèles théoriques pour des ordres croissants de séparation d'échelle.

Ce travail a fait l'objet d'une publication [*Maugis et al. 2002b*], annexée à ce document.

3.1 Contexte théorique : l'approche par séparation d'échelles

L'hypothèse de Dupuit selon laquelle les écoulements ne varient pas verticalement est supposée ici satisfaite. Elle permet de travailler avec des valeurs de perméabilité, charge et vitesse de Darcy moyennées sur l'épaisseur de l'aquifère, et d'utiliser la transmissivité dans le cadre d'un aquifère 2D équivalent. La log-transmissivité Y est supposée gaussienne et stationnaire. On a choisi pour décrire sa corrélation spatiale une loi exponentielle d'échelle intégrale λ , égale à la longueur de corrélation dans ce cas précis. Il est admis que la forme spécifique de cette loi de corrélation n'a pas d'effet prépondérant en milieu gaussien faiblement hétérogène, pourvu qu'elle soit monotone à décroissance rapide. En d'autres termes, on aurait pu tout aussi bien choisir une loi gaussienne ou sphérique. Comme au chapitre précédent, on prend pour simplifier un aquifère d'épaisseur unité, de sorte que l'on confond dans la suite perméabilité et transmissivité, de même que flux linéique et vitesse de Darcy. Cette dernière, \vec{U} , est supposée constante dans le temps. Le milieu est pris saturé et infini. La porosité a été prise constante égale à 1 pour simplifier les écritures, sans préjudice à sa prise en compte ultérieure par simple homothétie temporelle si elle s'avérait différente de 1 mais toujours constante dans l'espace et dans le temps. La position $\vec{X}(t)$ au temps t d'une particule lâchée à $t = 0$ au point $\vec{X}(0)$ est soumise à l'équation suivante :

$$\frac{\partial \vec{X}}{\partial t} = \vec{U}(\vec{X}(t)) \quad (3.1)$$

On partage la position particulière \vec{X} et la vitesse \vec{U} en deux : d'un côté la moyenne d'ensemble et de l'autre la fluctuation à moyenne nulle. Ceci donne : $\vec{X} = \langle \vec{X} \rangle + \vec{x}$ et $\vec{U} = \langle \vec{U} \rangle + \vec{u}$. (3.1) donne alors

$$\frac{\partial \vec{X}}{\partial t} = \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle + \vec{x}(t)) \rangle + \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle + \vec{x}(t)) \quad (3.2)$$

Si l'on suppose que les fluctuations de position sont petites par rapport à la position moyenne (ce qui demande une distance suffisante de transport préalable), le développement de Taylor au premier ordre peut suffire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{X}}{\partial t} &= \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle + \left[\vec{\nabla} \otimes \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle \right] \times \vec{x}(t) \\ &+ \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) + \left[\vec{\nabla} \otimes \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \right] \times \vec{x}(t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

où \otimes désigne le produit tensoriel. L'identification des moyennes ($\langle \dots \rangle$) et des fluctuations (\dots') permet d'écrire

$$\begin{cases} \frac{\partial \langle \vec{X} \rangle}{\partial t} &= \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle + \left[\vec{\nabla} \otimes \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \right] \times \vec{x}(t) \\ \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} &= \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) + \left[\vec{\nabla} \otimes \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle \right] \times \vec{x}(t) + \left(\left[\vec{\nabla} \otimes \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \right] \times \vec{x}(t) \right)' \end{cases} \quad (3.4)$$

L'approximation de Dagan consiste en l'estimation des fluctuations de vitesse au point correspondant à la position moyenne de particule au temps considéré [Dagan 1989], *i.e.* en négligeant le quatrième terme de l'équation (3.3), qui est du second ordre en fluctuation de transmissivité y . L'équation sur la position se simplifie alors en

$$\begin{cases} \frac{\partial \langle \vec{X} \rangle}{\partial t} &= \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle \\ \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} &= \vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) + \left[\vec{\nabla} \otimes \langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle \right] \times \vec{x}(t) \end{cases} \quad (3.5)$$

On constate à travers ce résultat que la trajectoire moyenne est égale à la trajectoire d'une particule obtenue dans le champ de vitesse moyen. Nous allons maintenant faire des estimations d'ordres de grandeur. La séparation d'échelles intervient lorsque l'on compare les échelles typiques du transport et de l'écoulement moyen. Pour la première, on peut s'attendre à ce qu'elle soit de l'ordre de λ , la longueur de corrélation de la log-transmissivité ; tandis que l'écoulement moyen varie à une échelle qui lui est propre L . Ainsi, dans l'équation (3.5)b, le premier terme est d'ordre U , et le second d'ordre ηU , où $\eta = \lambda/L$ est le coefficient de séparation d'échelles. Par conséquent, conserver ces deux termes nous place dans une approximation à l'ordre 1 de la séparation d'échelles, mais conserver le premier terme seulement constitue l'ordre 0. Cette analyse, qui s'appuie sur des "jauges" λ , L , ou η représentatives d'une échelle de variation, et qui définit des ordres de développement asymptotique [Cole et Kevorkian 1981], est héritée de Monavon (1990, 1993) qui en a fait un usage extensif en mécanique des fluides. La jauge η , figurant l'intensité de la séparation

des échelles d'écoulement et d'hétérogénéité, fut mise en évidence par Mouche et al. (1996).

Quel que soit l'ordre considéré de séparation d'échelle, le calcul des variances de position $\langle x_i x_j \rangle(t)$ requiert la résolution de (3.5)b afin d'en déduire $\vec{x}(t)$.

3.1.1 Dispersivité et variance de position en écoulement uniforme

Réécrivons rapidement les expressions des dispersivités en fonction des variances de position en écoulement uniforme, telles qu'elles sont données par le modèle linéarisé de Dagan (1989a). Dans ce paragraphe, on choisit d'écrire la vitesse de Darcy différemment des autres parties afin de souligner la spécificité des résultats énoncés liée au caractère uniforme du champ de vitesse moyenne. Contrairement au chapitre précédent, l'axe 1 est placé dans le sens de l'écoulement moyen $\langle \vec{V} \rangle$. On note \vec{v} les fluctuations de vitesse. Après une distance de transport s ,

$$\overline{\alpha}^{unif}(s) = \int_{r=0}^s \left. \frac{\langle \vec{v} \otimes \vec{v} \rangle}{V^2} \right|_{(r;0)} dr \quad (3.6)$$

et

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x} \rangle(s) = \iint_{s', s''=0}^s \left. \frac{\langle \vec{v} \otimes \vec{v} \rangle}{V^2} \right|_{(s''-s';0)} ds' ds'' \quad (3.7)$$

L'indépendance de ces deux quantités à l'amplitude de la vitesse moyenne est remarquable. Elle découle du modèle linéarisé dans lequel les fluctuations de vitesse sont proportionnelles à $\langle V \rangle$. La dispersivité est liée au second moment de position par la relation :

$$\overline{\alpha}(s) = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \langle \vec{x} \otimes \vec{x} \rangle}{\partial s} \right|_s \quad (3.8)$$

ou, réciproquement,

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x} \rangle(s) = 2 \int_{r=0}^s \overline{\alpha}(r) dr \quad (3.9)$$

Ces définitions peuvent être étendues à tout type d'écoulement. Elles rassemblent tous les phénomènes agissant sur les seconds moments de position, mais, par ce fait-même, ne décrivent ni ne prennent en compte aucun caractère non gaussien de la distribution de soluté.

3.1.2 Dispersivité et variance de position à l'ordre zéro de la séparation d'échelle

Pour de petits coefficients de séparation d'échelle η , le second terme de l'éq. (3.5)b est négligeable. On peut alors écrire simplement la corrélation de position :

$$\langle x_i x_j \rangle(t) = \iint_{t', t''=0}^t \left\langle u_i(\langle \vec{X}(t') \rangle) u_j(\langle \vec{X}(t'') \rangle) \right\rangle dt' dt'' \quad (3.10)$$

qui peut se réécrire sous la forme tensorielle que voici :

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x} \rangle(t) = \iint_{t', t''=0}^t \langle \vec{u}(\vec{X}') \otimes \vec{u}(\vec{X}'') \rangle dt' dt'' \quad (3.11)$$

avec la convention $\vec{X}' = \langle \vec{X}(t') \rangle$ et $\vec{X}'' = \langle \vec{X}(t'') \rangle$. Appelons maintenant $\overline{\overline{P}}(t)$ la matrice de transfert du repère orthonormé de référence ($\langle \vec{X}(0) \rangle; i_1, i_2$) au repère local ($\langle \vec{X}(t) \rangle; i'_1, i'_2$). L'algèbre linéaire indique que $\overline{\overline{P}}(t)$ est une rotation plane :

$$\overline{\overline{P}}(t) = \frac{1}{U} \begin{bmatrix} U_1 & -U_2 \\ U_2 & U_1 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

où U_1 , U_2 et U sont respectivement les composantes et norme de la vitesse moyenne au point $\langle \vec{X}(t) \rangle$. Le tenseur $\overline{\overline{P}}(t)$ enregistre la direction de cette vitesse – et non sa norme – sur la trajectoire moyenne parcourue pour un temps de parcourt t . Il est donc indépendant de la réalisation. Les fluctuations de vitesse \vec{u}' dans la base locale sont définies par

$$\vec{u}(\langle \vec{X}(t) \rangle) = \overline{\overline{P}}(t) \times \vec{u}'(\langle \vec{X}(t) \rangle) \quad (3.13)$$

L'équation (3.11) devient

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x} \rangle(t) = \iint_{t', t''=0}^t \overline{\overline{P}}(t') \langle \vec{u}'(\vec{X}') \otimes \vec{u}'(\vec{X}'') \rangle {}^t\overline{\overline{P}}(t'') dt' dt'' \quad (3.14)$$

où ${}^t\overline{\overline{P}}$ est la transposée de $\overline{\overline{P}}$.

Les covariances de vitesse de l'intégrande ont une portée finie de quelques λ [Rubin 1991]. En vertu de l'approximation de la séparation d'échelle, selon laquelle l'échelle de variation de la vitesse moyenne est très grande par rapport à λ , on peut supposer $\langle \vec{U} \rangle$ constante autour de \vec{X}' . Ceci revient à considérer l'écoulement localement uniforme, et a pour intérêt de poser $\|\langle \vec{U}(\vec{X}') \rangle\| \approx \|\langle \vec{U}(\vec{X}'') \rangle\|$ et $P(t') \approx P(t'')$. En conséquence, la corrélation normalisée de vitesse dans le repère local est proche de celle en écoulement uniforme :

$$\frac{\langle \vec{u}'(\vec{X}') \otimes \vec{u}'(\vec{X}'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(\vec{X}') \rangle\| \|\langle \vec{U}(\vec{X}'') \rangle\|} \approx \frac{\langle \vec{u}'(\vec{X}') \otimes \vec{u}'(\vec{X}' + \vec{r}) \rangle}{\|\langle \vec{U}(\vec{X}') \rangle\|^2} \quad (3.15)$$

Deux méthodes d'estimation de la distance de séparation équivalente \vec{r} s'offrent alors. Soit on la choisit en se référant au temps : $\vec{r} = \vec{X}'' - \vec{X}'$ de coordonnées ($\|\langle \vec{U}(\vec{X}') \rangle\| \cdot (t'' - t')$; 0) dans le repère local ; soit en se référant aux distances parcourues : $\vec{r} = \vec{X}'' - \vec{X}'$ de coordonnées $(s'' - s'; 0)$ (voir figure 3.1). Bien que cette dernière possibilité ne tombe pas directement sous l'ordre zéro de la séparation d'échelle, elle représente une petite amélioration au modèle, parce que les grandeurs normalisées concernant le transport comme les variances de vitesse normalisée, la dispersivité ou les variances de position dépendent plus de distances parcourues

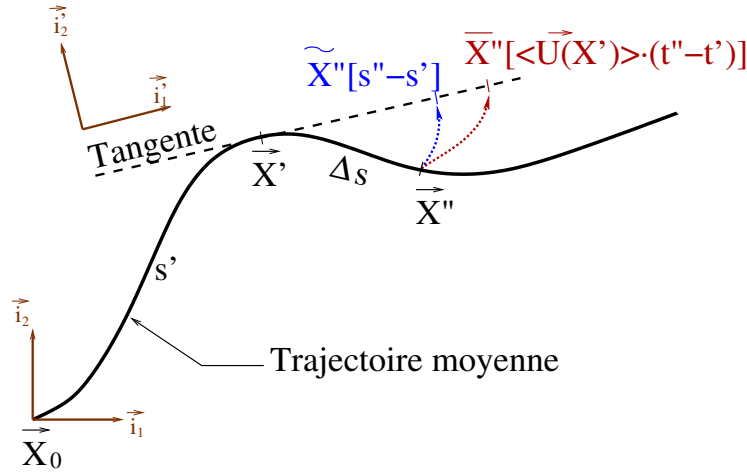


FIG. 3.1: Représentation de l'ordre zéro de séparation d'échelle.

\tilde{X}'' et \tilde{X}'' sont deux positions approchées possibles du second point d'intégration \tilde{X}'' ; l'une par rapport à des incréments de temps, l'autre par rapport à des incréments de distance. La trajectoire est approchée localement par sa tangente, parcourue à la vitesse constante $\langle \vec{U}(\vec{X}') \rangle$ prise au premier point d'intégration.

que du temps. Le temps n'introduit en effet qu'une dépendance apparente avec la norme de la vitesse moyenne.

L'équation (3.14) donne alors :

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x}(t) \rangle = \iint_{t', t''=0}^t \overline{\overline{P}}(t') \frac{\langle \vec{u}' \otimes \vec{u}' \rangle}{\|\langle \vec{U} \rangle\|^2} \Big|_{s''=s'; 0}^{unif.} \overline{\overline{P}}(t') \|\langle \vec{U}(\vec{X}') \rangle\| dt' \|\langle \vec{U}(\vec{X}'') \rangle\| dt'' \quad (3.16)$$

L'utilisation des coordonnées curvilignes s , qui posent l'équivalence avec le temps de transport, montre que, pour une distance moyenne de parcourt donnée, les variances de position dépendent seulement des changements dans l'orientation de la vitesse, et non de ses changements d'amplitude. s étant définie par

$$s(t) = \int_{t'=0}^t \|\langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t') \rangle) \rangle\| dt' \quad \text{ou} \quad ds = \|\langle \vec{U}(\langle \vec{X}(t) \rangle) \rangle\| dt \quad (3.17)$$

on a

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x}(s) \rangle = \iint_{s', s''=0}^s \overline{\overline{P}}(s') \frac{\langle \vec{u}' \otimes \vec{u}' \rangle}{\|\langle \vec{U} \rangle\|^2} \Big|_{(s''=s'; 0)}^{unif.} \overline{\overline{P}}(s') ds' ds'' \quad (3.18)$$

Rubin a montré qu'en écoulement uniforme, les covariances de vitesse sont paires vis-à-vis de la distance longitudinale de séparation [Rubin 1991]. $\frac{\langle \vec{u}' \otimes \vec{u}' \rangle}{\|\langle \vec{U} \rangle\|^2}(s'' - s')$ est donc symétrique eu égard à $(s'' - s')$. Par l'usage de cette propriété, l'intégrale (3.18)

peut être partagée en deux intégrales égales, si bien que

$$\langle \vec{x} \otimes \vec{x}(s) \rangle = 2 \int_{s'=0}^s \int_{s''=0}^{s'} \overline{\overline{P}}(s') \frac{\langle \vec{u}' \otimes \vec{u}'' \rangle}{\|\langle \vec{U} \rangle\|^2} \Big|_{(s''-s';0)}^{unif.} \overline{\overline{P}}(s') ds' ds'' \quad (3.19)$$

Les équations (3.19), (3.8) et (3.6) permettent de conclure sur la relation entre la dispersivité à l'ordre zéro de la séparation d'échelles et celle correspondant à un écoulement uniforme :

$$\overline{\overline{\alpha}}^{(0)}(s) = \overline{\overline{P}}(s) \overline{\overline{\alpha}}^{unif.}(s) \overline{\overline{P}}(s) \quad (3.20)$$

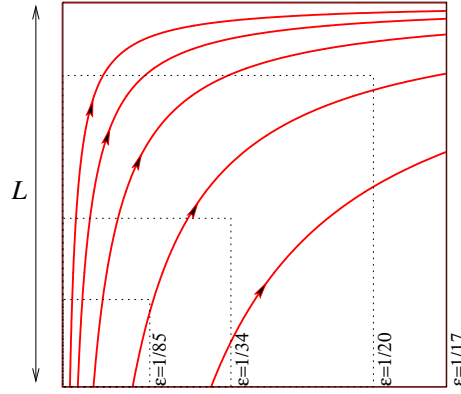
Ceci met en évidence le caractère tensoriel de la dispersivité, qui garde par ailleurs sa validité en terme de dérivée curviligne de la demi-variance de position. En d'autres termes, et dans le cadre de l'ordre zéro de la séparation d'échelles, le tenseur de dispersion est encore défini et égal à la dispersivité locale multipliée par la vitesse moyenne locale.

Les expressions (3.19) et (3.20) peuvent être calculées semi-analytiquement par ordinateur pour des écoulements et des points de lâcher donnés, en utilisant les covariances de vitesse rendues disponibles par l'approximation (3.15). Ce choix est cohérent avec la formulation des fluctuations de position (3.5)b.

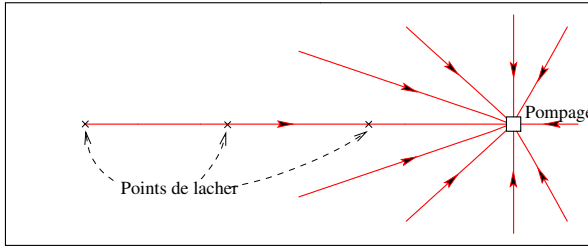
3.1.3 Dispersivité et variance de position à l'ordre un de la séparation d'échelle

Si la non-uniformité d'un écoulement est légère, l'équation (3.10) devrait s'avérer suffisante pour prédire la variance de position en intégrant seulement les changements dans la direction de la vitesse moyenne le long de la trajectoire moyenne. Dans ce cas, en effet, l'information le long de cette ligne décrit à peu près correctement ce qui se passe autour d'elle. Lorsque la non-uniformité de l'écoulement se renforce, le comportement stochastique de la vitesse varie rapidement dans l'espace. Eu égard à l'approximation du premier ordre, cela est particulièrement vrai pour la vitesse moyenne. Dans un milieu hétérogène, une particule s'écartant de la trajectoire moyenne se retrouve sur une autre trajectoire moyenne (correspondant à un point de lâcher différent), soumis à des statistiques différentes. D'un point de vue mathématique, de fortes non-uniformités signifient que η , le coefficient de séparation d'échelle, est suffisamment élevé pour que le second terme de (3.5)b ne puisse plus être négligé. Cette dernière équation doit alors être résolue pour dériver \vec{x} étant donnée une forme spécifique du jacobien de vitesse. Cette résolution a été menée pour trois différents types d'écoulement (Fig. 3.2) :

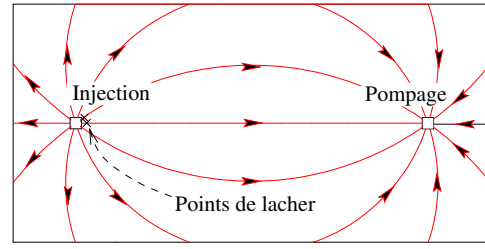
1. écoulement tournant sans recharge,
2. écoulement radial convergent autour d'un unique puits de pompage,
3. écoulement dipolaire entre un puits d'injection et un puits de pompage de forces égales.



(a) Écoulement tournant



(b) pompage simple



(c) pompage dipolaire

FIG. 3.2: Schémas des trois types d'écoulement envisagés dans cette étude. Les points de lâcher sont figurés par des X. A gauche, les fenêtres intérieures montrent les zones étudiées suivant la valeur du coefficient de séparation d'échelles ε

Dans les deux derniers cas, on a ignoré un éventuel gradient de charge naturel qui, s'il constitue un cas d'espèce intéressant, n'apporte pourtant rien d'un point de vue de la présente démonstration. Les dispersivités s'obtiennent par dérivation curviligne des variances de position.

3.1.3.1 Variances de position en écoulement tournant sans recharge

Ce type d'écoulement peut être obtenu grâce à une charge piézométrique décrite par une fonction quadratique des variables d'espace. On a choisi une forme telle que le gradient de charge moyenne \vec{J}_0 soit parallèle à l'axe 2 à l'origine, et qu'il rencontre une frontière perpendiculaire à une certaine distance \mathcal{L}_∞ caractéristique plus ou moins lointaine.

$$\langle H(x_1, x_2) \rangle = H_0 - J_0 x_2 - \frac{J_0}{2\mathcal{L}_\infty} (x_1^2 - x_2^2) \quad (3.21)$$

Le coefficient de séparation d'échelle peut être défini, en terme d'ordre de grandeur, par $\eta = \lambda/\mathcal{L}_\infty$.

Dans ce cas précis, la vitesse moyenne a la forme suivante :

$$\langle \vec{U}(x_1, x_2) \rangle = U_0 \begin{vmatrix} x_1/\mathcal{L}_\infty \\ 1 - x_2/\mathcal{L}_\infty \end{vmatrix} \quad (3.22)$$

où $U_0 = -K_G J_0$ est la vitesse moyenne à l'origine (à l'ordre 2 en σ_y), et K_G la moyenne géométrique de la transmissivité.

La jacobienne de vitesse moyenne est alors très simple :

$$\vec{\nabla} \otimes \langle \vec{U}(\vec{X}) \rangle = \frac{U_0}{\mathcal{L}_\infty} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

ce qui permet de réécrire l'équation (3.5)b explicitement :

$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} &= u_1(\langle \vec{X}(t) \rangle) + Ax_1 \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} &= u_2(\langle \vec{X}(t) \rangle) - Ax_2 \end{cases} \quad (3.24)$$

où $A = U_0/\mathcal{L}_\infty$. La résolution de l'équation différentielle (3.24) donne l'expression suivante des fluctuations de position particulière, nulles en $t = 0$:

$$\begin{cases} x_1(t) = \int_{t'=0}^t u_1(\langle \vec{X}(t') \rangle) \frac{e^{At}}{e^{At'}} dt' \\ x_2(t) = \int_{t'=0}^t u_2(\langle \vec{X}(t') \rangle) \frac{e^{At}}{e^{At'}} dt' \end{cases} \quad (3.25)$$

En remplaçant les variables temporelles par l'abscisse curviligne équivalente le long de la trajectoire moyenne, on obtient, avec la convention d'écriture $f[\langle \vec{X}(t) \rangle] = f[s(t)]$, et sachant que $dt = ds/\langle \vec{U}(s) \rangle$:

$$\begin{cases} \langle x_1^2(s) \rangle &= \iint_{s', s''=0}^s \frac{\langle u_1(s') u_1(s'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'') \rangle\|} \frac{e^{At(s)}}{e^{At(s')}} \frac{e^{At(s)}}{e^{At(s'')}} ds' ds'' \\ \langle x_1 x_2(s) \rangle &= \iint_{s', s''=0}^s \frac{\langle u_1(s') u_2(s'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'') \rangle\|} \frac{e^{At(s')}}{e^{At(s'')}} ds' ds'' \\ \langle x_2^2(s) \rangle &= \iint_{s', s''=0}^s \frac{\langle u_2(s') u_2(s'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'') \rangle\|} \frac{e^{At(s')}}{e^{At(s')}} \frac{e^{At(s'')}}{e^{At(s)}} ds' ds'' \end{cases} \quad (3.26)$$

Pour estimer scrupuleusement ces intégrales, il faudrait calculer analytiquement les covariances de vitesse à l'ordre un de la séparation d'échelle, ce qui est réalisable, mais extrêmement lourd. On préférera, dans cet exposé, recourir aux expressions analytiques des covariances de vitesse à l'ordre zéro, aisément disponibles.

3.1.3.2 Variances de position en écoulement radial convergent

Aux environs d'un puits ponctuel, situé à l'origine des coordonnées, pénétrant complètement une couche géologique captive, la vitesse de Darcy moyenne 2D sans gradient naturel ni recharge s'écrit :

$$\langle \vec{U}(\vec{X}) \rangle = -C \frac{\vec{X}}{X^2} \quad (3.27)$$

où C est le débit de pompage par unité de profondeur divisé par 2π .

On mène alors une démarche similaire au paragraphe précédent pour résoudre l'équation (3.5)b compte tenu de la forme (3.27). Considérons une particule lâchée, à $t = 0$, à la distance R_0 du puits (situé en l'origine des coordonnées) par exemple sur l'axe $\langle X_2 \rangle = 0$. La jacobienne de vitesse moyenne vaut sur cette trajectoire, qui reste appuyée sur cet axe :

$$\vec{\nabla} \otimes \langle \vec{U}(\vec{X}) \rangle = -\frac{C}{\langle X_1 \rangle^2} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

Les fluctuations de position s'obtiennent alors par l'équation (3.5)b :

$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} = u_1(\langle \vec{X}(t) \rangle) + C \frac{x_1}{\langle X_1 \rangle^2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} = u_2(\langle \vec{X}(t) \rangle) - C \frac{x_2}{\langle X_1 \rangle^2} \end{cases} \quad (3.29)$$

sachant que $\langle X_1 \rangle = \sqrt{1 - \frac{t}{t_s}}$, où $t_s = R_0^2/2C$ est le temps de sortie en milieu homogène. La résolution de cette équation différentielle mène à :

$$\begin{cases} x_1(t) = \int_{s'=0}^s \frac{u_1(s')}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\|} \frac{R_0-s'}{R_0-s} ds' \\ x_2(t) = \int_{s'=0}^s \frac{u_2(s')}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\|} \frac{R_0-s'}{R_0-s} ds' \end{cases} \quad (3.30)$$

On en déduit les variances de position :

$$\begin{cases} \langle x_1^2(s) \rangle = \iint_{s',s''=0}^s \frac{\langle u_1(s')u_1(s'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'') \rangle\|} \frac{R_0-s'}{R_0-s} \frac{R_0-s''}{R_0-s} ds' ds'' \\ \langle x_1 x_2(s) \rangle = \iint_{s',s''=0}^s \frac{\langle u_1(s')u_2(s'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'') \rangle\|} \frac{R_0-s'}{R_0-s} \frac{R_0-s''}{R_0-s} ds' ds'' \\ \langle x_2^2(s) \rangle = \iint_{s',s''=0}^s \frac{\langle u_2(s')u_2(s'') \rangle}{\|\langle \vec{U}(s') \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'') \rangle\|} \frac{R_0-s'}{R_0-s} \frac{R_0-s''}{R_0-s} ds' ds'' \end{cases} \quad (3.31)$$

Comme l'orientation de la vitesse est constante le long de la trajectoire moyenne, qui est rectiligne, les covariances normalisées de vitesse moyenne ci-dessus sont égales, à l'ordre zéro de la séparation d'échelle, à celles d'un écoulement uniforme telles que peut les décrire le modèle linéarisé. Ainsi, l'expression (3.31)b donne immédiatement $\langle x_1 x_2(t) \rangle = 0$, tandis que les expressions (3.31)a et (3.31)c peuvent être calculées numériquement avec facilité.

Afin de simplifier l'exposé, nous avons supposé que le puits était ponctuel. Pour prendre en compte un rayon r_w de puits non nul, il convient de remplacer R_0 par $R_0 - r_w$.

3.1.3.3 Variances de position en écoulement dipolaire

Le champ de vitesse entre un puits d'injection placé en $(-a, 0)$ et un puits de pompage de même force C placé en $(+a, 0)$ a la forme suivante :

$$\langle \vec{U}(\vec{X}) \rangle = C \left[\frac{\vec{X} + \vec{a}}{\|\vec{X} + \vec{a}\|^2} - \frac{\vec{X} - \vec{a}}{\|\vec{X} - \vec{a}\|^2} \right] \quad (3.32)$$

L'écoulement moyen n'est à l'évidence plus isotrope. Cette particularité a pour conséquence que des particules lâchées dans le puits d'injection ne vont pas se déplacer dans les mêmes structures de corrélation suivant leur angle de sortie du puits. Par exemple, une particule sortant par le point opposé au puits de pompage va s'éloigner indéfiniment du système ; alors que la même particule, sortant transversalement, va suivre un demi-cercle avant d'atteindre le puits de pompage. La trajectoire la plus rapide en moyenne suit le chemin direct, rectiligne, reliant les deux puits. C'est à cette trajectoire le long de l'axe $\langle X_2 \rangle = 0$ que nous allons nous attacher maintenant. L'origine des coordonnées est placée entre les deux puits. La jacobienne de vitesse moyenne vaut sur la trajectoire directe :

$$\vec{\nabla} \otimes \langle \vec{U}(\vec{X}) \rangle = C \begin{bmatrix} -\frac{1}{(\langle X_1 \rangle + a)^2} + \frac{1}{(\langle X_1 \rangle - a)^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{(\langle X_1 \rangle + a)^2} - \frac{1}{(\langle X_1 \rangle - a)^2} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

Les fluctuations de position s'obtiennent alors par l'équation (3.5)b :

$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} = u_1(\langle \vec{X}(t) \rangle) + Cx_1 \left[-\frac{1}{(\langle X_1 \rangle + a)^2} + \frac{1}{(\langle X_1 \rangle - a)^2} \right] \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} = u_2(\langle \vec{X}(t) \rangle) - Cx_2 \left[-\frac{1}{(\langle X_1 \rangle + a)^2} + \frac{1}{(\langle X_1 \rangle - a)^2} \right] \end{cases} \quad (3.34)$$

sachant que $t = \frac{1}{2Ca} \left(a^2 \langle X_1 \rangle - \frac{\langle X_1 \rangle^3}{3} + \frac{2a^3}{3} \right)$, la particule étant lâchée à $t = 0$ en $X_1 = -a$. La résolution de cette équation différentielle mène à :

$$\begin{cases} x_1(t) = \int_{X'_1=-a}^{\langle X_1(t) \rangle} \frac{u_1(X'_1, 0)}{\|\langle \vec{U}(X'_1, 0) \rangle\|} \frac{a^2 - X_1'^2}{a^2 - \langle X_1 \rangle^2} dX'_1 \\ x_2(t) = \int_{X'_1=-a}^{\langle X_1(t) \rangle} \frac{u_2(X'_1, 0)}{\|\langle \vec{U}(X'_1, 0) \rangle\|} \frac{a^2 - \langle X_1 \rangle^2}{a^2 - X_1'^2} dX'_1 \end{cases} \quad (3.35)$$

où $\langle X_1 \rangle$ est la position longitudinale moyenne d'une particule au temps t , autrement dit $s - a$. On en déduit les variances de position :

$$\begin{cases} \langle x_1^2(s) \rangle = \iint_{s', s''=0}^s \frac{\langle u_1(s', 0) u_1(s'', 0) \rangle}{\|\langle \vec{U}(s', 0) \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'', 0) \rangle\|} \frac{s'(R_0 - s')}{s(R_0 - s)} \frac{s''(R_0 - s'')}{s(R_0 - s)} ds' ds'' \\ \langle x_1 x_2(s) \rangle = \iint_{s', s''=0}^s \frac{\langle u_1(s', 0) u_2(s'', 0) \rangle}{\|\langle \vec{U}(s', 0) \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'', 0) \rangle\|} \frac{s'(R_0 - s')}{s(R_0 - s)} \frac{s''(R_0 - s'')}{s(R_0 - s)} ds' ds'' \\ \langle x_2^2(s) \rangle = \iint_{s', s''=0}^s \frac{\langle u_2(s', 0) u_2(s'', 0) \rangle}{\|\langle \vec{U}(s', 0) \rangle\| \|\langle \vec{U}(s'', 0) \rangle\|} \frac{s(R_0 - s)}{s'(R_0 - s')} \frac{s(R_0 - s)}{s''(R_0 - s'')} ds' ds'' \end{cases} \quad (3.36)$$

où $R_0 = 2a$. Nous avons encore $\langle x_1 x_2(t) \rangle = 0$, mais les expressions (3.36)a et (3.36)c se calculent moins aisément, en raison de la singularité introduite par les termes en s' et s'' en 0. Prendre en considération des puits de rayons égaux et non nuls r_w permet toutefois de circonvenir cette difficulté en remplaçant R_0 par $R_0 - r_w$, et s (et s' et s'' respectivement) par $s + r_w$. La variance de position transverse montre alors une dépendance en r_w , et tend vers l'infini si ce rayon tend vers zéro. Cela signifie que, plus le puits d'injection est petit, moins la position transversale d'une particule est définie.

3.2 Résultats numériques

Dans ce paragraphe, nous présentons les résultats des calculs semi-analytiques présentés au paragraphe 3.1 précédent en comparaison aux résultats de simulation de Monte-Carlo des statistiques de position pour les trois types d'écoulement envisagés.

3.2.1 Cadre numérique

La méthode de simulation de Monte-Carlo implémentée dans Cast3M [Verpeaux *et al* 1988 ; Fichoux 1998] a fait ses preuves dans des études précédentes du transport en écoulement uniforme [Mouche *et Lemaire* 1995]. Son extension aux cas non uniformes devrait rester fiable. Les champs de perméabilité sont générés par la méthode de décomposition matricielle dans les cas de charge linéaire ou quadratique (écoulements uniformes ou tournants). Par contre, la quantité de mémoire nécessaire pour appliquer cette méthode aux cas avec puits, dont les maillages sont beaucoup plus imposants, la rendait inapplicable eu égard à nos capacités de calcul. On a donc utilisé la méthode des bandes tournantes [Matheron 1973 ; Mantoglou *et Wilson* 1982, ces derniers ayant testé la méthode], plus lente mais aussi moins gourmande en espace mémoire dans les cas avec puits. Les valeurs sont générées aux centres des mailles et supposées constantes par maille. Celles-ci sont carrées, de taille $\lambda/4$ dans le premier cas, et $\lambda/5$ dans les deux derniers. La vitesse de Darcy est calculée par une méthode aux Éléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH). Le nombre de réalisations aléatoires, quant à lui, qui est nécessaire pour obtenir une bonne estimation des statistiques, dépend de σ_y : 800, 1000, 1500 et 2000 réalisations furent nécessaires pour $\sigma_y=0.1, 0.5, 1$ et 1.5 respectivement. L'étude de la vitesse de convergence statistique des charge, vitesse, position moyenne et variances de position a montré que ces choix présentaient un compromis satisfaisant entre précision et coût numérique. Enfin, les trajectoires sont générées par une méthode explicite (Cf. chapitre 4).

Les discrétisations choisies diminuent légèrement l'écart-type *a posteriori* des champs de perméabilité par rapport à leur valeur théorique σ_y aux centres des mailles. Il en est de même pour la longueur de corrélation. Bien qu'une correction de cet effet puisse se révéler nécessaire si l'on s'intéresse à la perméabilité effective dans le voisinage immédiat des puits [Desbarats 1992], elle ne s'impose pas pour le calcul des moments du second ordre du transport, car ceux-ci ne dépendent pas de la norme de la vitesse moyenne (Cf. §3.1.2). On peut donc considérer que la discrétisation choisie est suffisamment fine pour l'étude des fluctuations de vitesse et de position.

3.2.2 Simulation en écoulement tournant sans recharge

Ce type d'écoulement tournant quadratique a bénéficié de l'étude de ses variables cinématiques, en 3D, par une méthode directe [Mouche *et al.* 1996]. Les auteurs prouvèrent que les deux premiers moments de charge et de vitesse pouvaient être calculés en supposant un écoulement localement uniforme. On emploie ici une

méthode de Monte-Carlo sur le même type d'écoulement, mais dans un aquifère 2D confiné, avec des conditions aux limites de charge. Les calculs ont été exécutés avec pour coefficient de séparation d'échelle $\eta = \lambda/\mathcal{L}_\infty = 1/85$, $1/34$ et $1/20$ sur un même domaine carré de 17λ de côté (voir Fig. 3.3). Cette taille est suffisante pour que la non-uniformité de l'écoulement se déploie. Une précédente analyse de l'effet de conditions aux limites de charge (Cf. chapitre 2) a montré qu'on avait peu à craindre d'influence longitudinale sur le transport si les particules sont lâchées à au moins 3λ du bord amont. De plus, une particule lâchée aux alentours de l'axe longitudinal médian devrait rester assez éloignée des bords latéraux pour qu'ils l'influencent. Il est donc légitime de considérer les simulations exemptes d'influence stochastiques issues des conditions aux limites sur une distance d'environ 11λ .

Trois niveaux d'hétérogénéité, au demeurant relativement faibles, ont été explorés : $\sigma_y = 0.2$, 0.5 et 1 , mais on ne montre que les résultats à $\sigma_y = 0,5$ (fig. 3.3). Tous les résultats ont été normalisés par rapport à la longueur de corrélation λ et à l'amplitude σ_y . Lorsqu'il était souhaitable de comparer les résultats avec un cas d'écoulement uniforme, on a choisi ceux induits par un écoulement moyen rectiligne généré par le vecteur vitesse au point de lâcher.

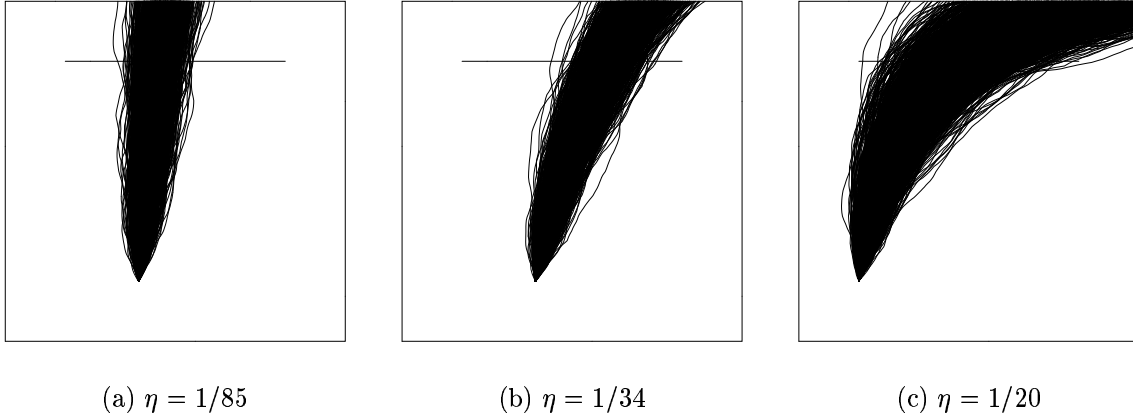
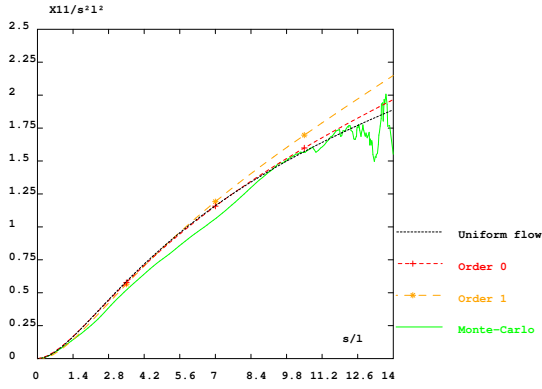
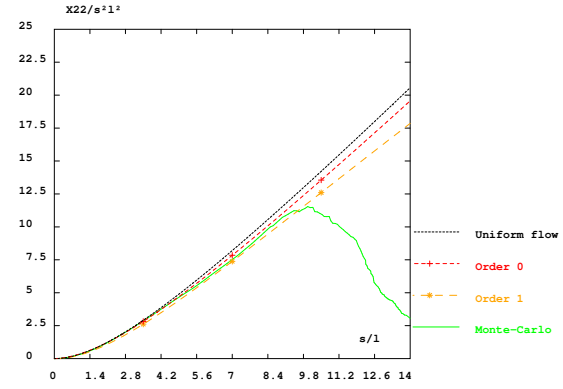
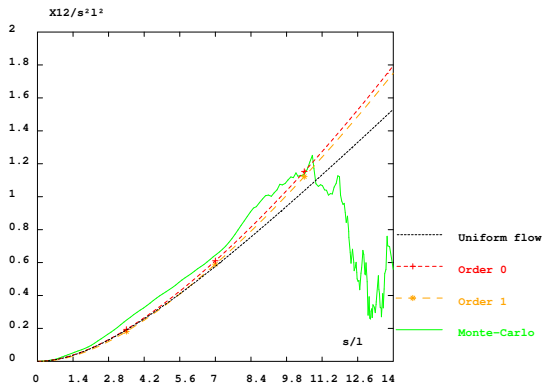
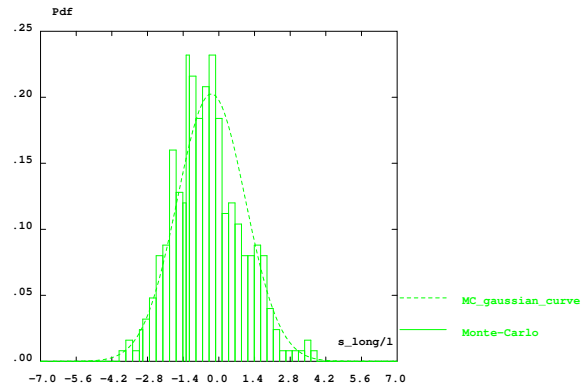
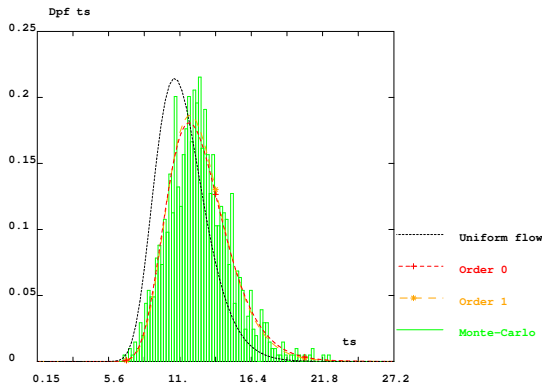
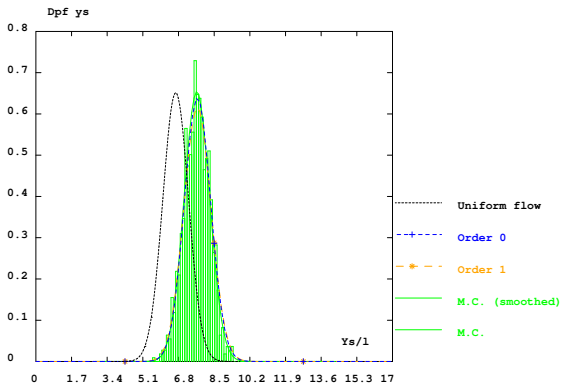


FIG. 3.3: Panaches de particules en écoulement : quasi-uniforme (a), modérément (b) et fortement (c) tournants. On a superposé les trajectoires obtenues par convection pure pour chacune des 1000 réalisations équiprobables de champ de perméabilité. Le plan de sortie à 11λ du point de lâcher, est à chaque fois tracé.

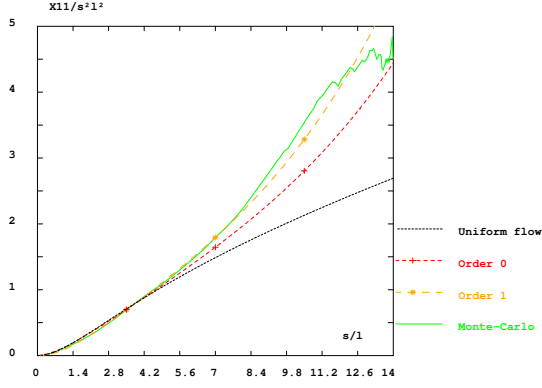
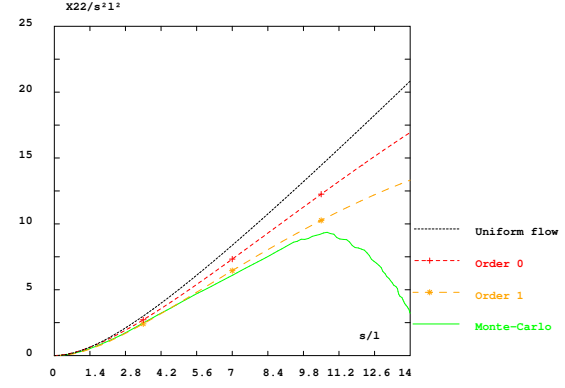
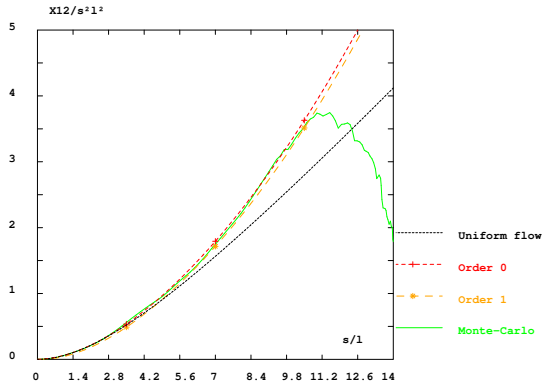
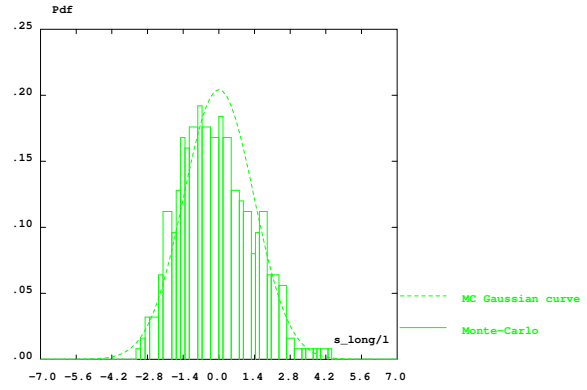
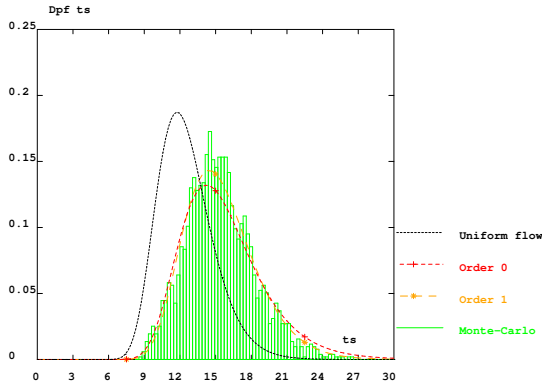
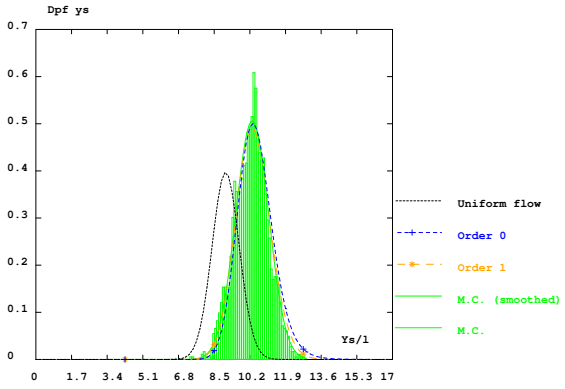
3.2.2.1 Moments de position particulaire

$\langle \mathbf{X}_1 \rangle$ et $\langle \mathbf{X}_2 \rangle$ Les différents modèles prenant tant soit peu en compte la non-uniformité de l'écoulement (ordre 0 et supérieur de séparation d'échelle) prédisent parfaitement bien les évolutions de position moyenne au cours du temps (non présentées). Ce résultat apparemment anodin signifie que la perméabilité effective définie, d'un point de vue du transport, par la valeur à affecter à un milieu homogène sou-

(a) variance de position X_{11} .(b) variance de position X_{22} .(c) covariance de position X_{12} .(d) Pdf de position le long de la trajectoire moyenne après 7λ de parcours moyen.(e) Pdf du temps d'arrivée. ts a été normalisé par λ/U_0 , où U_0 est la vitesse moyenne à l'ordre 0 à l'origine.

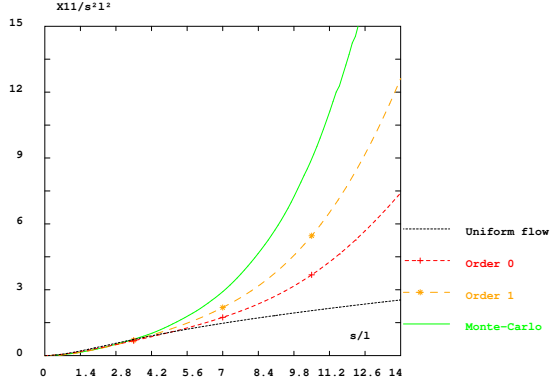
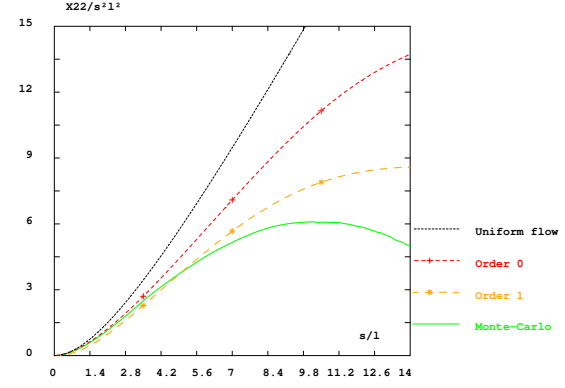
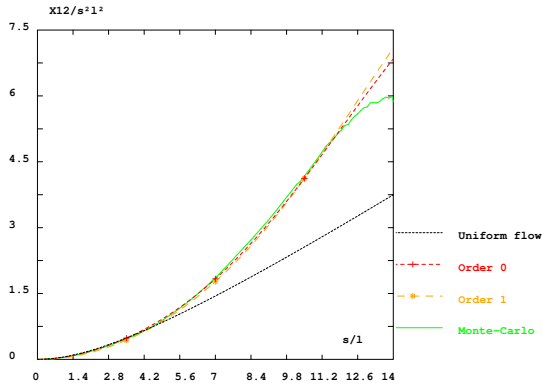
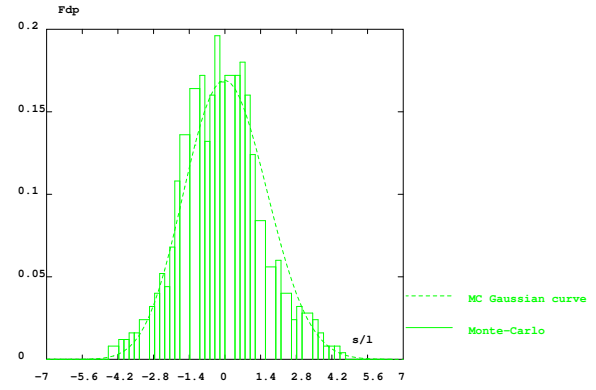
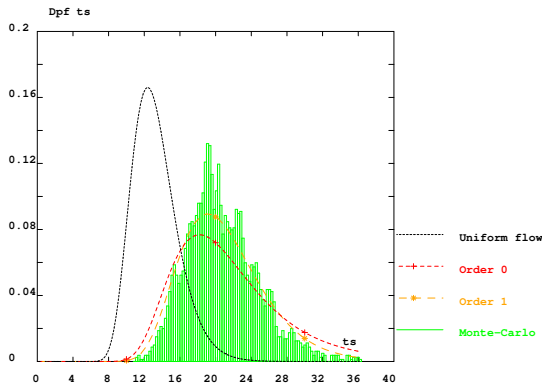
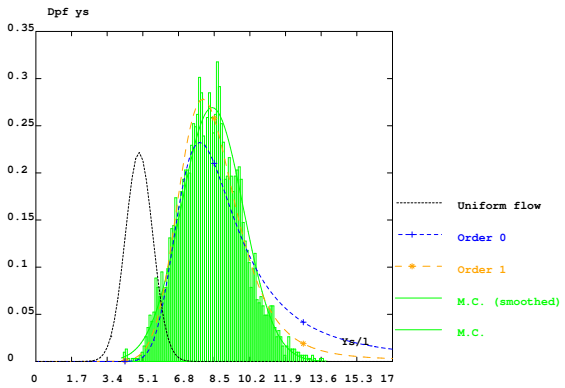
(f) Pdf de l'ordonnée d'arrivée.

FIG. 3.4: Propriétés statistiques du transport en écoulement quasi-uniforme ($\eta = 1/85$, fig. 3.3a). L'écoulement uniforme suppose un vecteur vitesse constant à partir du point de lâcher. L'ordre 1 de la sép. d'échelle tient compte des variations de vitesse moyenne autour de la position moyenne de particule. L'ordre 0 ne tient compte que des changements d'orientation de la vitesse moyenne.


 (a) variance de position X_{11} .

 (b) variance de position X_{22} .

 (c) covariance de position X_{12} .

 (d) Pdf de position le long de la trajectoire moyenne après 7λ de parcours moyen.

 (e) Pdf du temps d'arrivée. ts a été normalisé par λ/U_0 , où U_0 est la vitesse moyenne à l'ordre 0 à l'origine.


(f) Pdf de l'ordonnée d'arrivée.

FIG. 3.5: Propriétés statistiques du transport en écoulement tournant ($\eta = 1/34$, fig. 3.3b). L'écoulement uniforme suppose un vecteur vitesse constant à partir du point de lâcher. L'ordre 1 de la sép. d'échelle tient compte des variations de vitesse moyenne autour de la position moyenne de particule. L'ordre 0 ne tient compte que des changements d'orientation de la vitesse moyenne.

(a) variance de position X_{11} .(b) variance de position X_{22} .(c) covariance de position X_{12} .(d) Pdf de position le long de la trajectoire moyenne après 7λ de parcours moyen.(e) Pdf du temps d'arrivée. ts a été normalisé par λ/U_0 , où U_0 est la vitesse moyenne à l'ordre 0 à l'origine.

(f) Pdf de l'ordonnée d'arrivée.

FIG. 3.6: Propriétés statistiques du transport en écoulement fortement tournant ($\eta = 1/20$, fig. 3.3c). L'écoulement uniforme suppose un vecteur vitesse constant à partir du point de lâcher. L'ordre 1 de la sép. d'échelle tient compte des variations de vitesse moyenne autour de la position moyenne de particule. L'ordre 0 ne tient compte que des changements d'orientation de la vitesse moyenne.

mis à des conditions aux limites identiques de charge pour qu'il donne la même trajectoire temporelle du centre de gravité du panache, n'est pas changée par une non-uniformité conservative (sans terme source) de l'écoulement. On verra que c'est loin d'être le cas en présence de sources ponctuelles.

X_{11} et X_{22} Lorsque l'écoulement est légèrement tournant ($\eta = 1/85$), les différents modèles donnent des résultats similaires et également convenables du point de vue des variances de position X_{ii} (Fig. 3.4a et 3.4b). Pour cette petite valeur de η , on peut à l'évidence considérer l'écoulement comme uniforme.

Si la non-uniformité croît un peu jusqu'à $\eta = 1/34$ (Fig. 3.5a et 3.5b), les différents modèles se discriminent, montrant qu'il est déjà nécessaire de prendre en compte les changements d'orientation de la vitesse moyenne (ordre zéro de la séparation d'échelles). A mesure que la vitesse change graduellement d'orientation de l'axe 1 vers l'axe 2, la dispersivité longitudinale contribue de façon croissante à X_{11} tandis que la contribution de la dispersivité transverse, un ordre de grandeur plus faible, diminue. Symétriquement, X_{22} diminue comparativement à la valeur en écoulement uniforme du fait du remplacement progressif de la contribution de α_L par α_T . L'ordre zéro ne suffit pourtant déjà plus et il faut aussi prendre en compte les gradients de vitesse moyenne (ordre un), invalidant de ce fait l'hypothèse d'écoulement localement uniforme.

L'étude d'un niveau de non-uniformité plus élevé (Fig. 3.6a et 3.6b) suggère que des ordres plus élevés des dérivées de la vitesse entrent en jeu, bien que le modèle à l'ordre un améliore nettement la qualité des prédictions.

X_{12} Cette auto-corrélation croisée de position particulière ne semble pas, quoique le processus ne soit pas éclairci actuellement ((Fig. 3.4c, 3.5c 3.6c), dépendre du niveau de non-uniformité.

3.2.2.2 Densité de probabilité de position

Une étude préalable [Maugis 1997a] a montré comment la loi de distribution de position n'est pas gaussienne aux temps courts pour ce qui est de ses moments d'ordre 3 (pour α_L) et 4 (pour α_T). La position particulière redevient un processus gaussien en écoulement uniforme lorsque le parcours dépasse une certaine distance (3λ quand σ_y vaut 0.5, à 7λ quand σ_y vaut 1) dépendant du niveau d'hétérogénéité. Cette propriété est encore vérifiée en écoulement tournant où, à courte distance, la gaussianité de la position particulière est approximative, mais devient claire au-delà des 3λ prévu de parcours minimum (Fig. 3.4d, 3.5d et 3.6d).

Ceci peut s'expliquer par le théorème central limite, stipulant que la gaussianité d'une variable aléatoire s'obtient après un nombre suffisant de réalisations décorréliées. Ici, il suffirait que la particule aie subi un nombre suffisant de fluctuations de vitesse, indépendamment de l'histoire de la vitesse moyenne.

3.2.2.3 Temps et ordonnées d'arrivée

Dans la mesure où la position particulière s'est avérée gaussienne à partir d'un parcours suffisant, on peut calculer théoriquement les propriétés statistiques des temps t_s et ordonnées Y_s d'arrivée sur un plan suffisamment éloigné (11λ), par intégration de fonctions dépendant des variances de position uniquement [Maugis 1997b, annexes] pour une présentation détaillée du calcul). Une petite réserve doit cependant être émise pour l'intégration temporelle menant à l'estimation de Y_s dans laquelle on espère que la contribution des temps faibles, où la position n'est pas gaussienne, restera faible.

Les simulations montrent que les statistiques des lois de sortie sont correctement prédites, quel que soit le taux de virage (Fig. 3.4, 3.5, 3.6 e et f) avec l'exception du modèle d'écoulement uniforme qui commet une erreur compréhensible étant donné le choix de la vitesse au point de lâcher, qui ne respecte pas le temps moyen de parcours.

3.2.2.4 Conclusion sur l'écoulement tournant

Les conclusions sont plus ou moins optimistes selon l'aire d'intérêt.

Les statistiques des variables d'arrivée sont bien prédites par les modèles, à condition que leurs grandeurs moyennes soient correctement identifiées, sans doute parce que la position de particule reste une variable gaussienne pour le domaine d'hétérogénéité et de non-stationnarité considéré.

D'un point de vue des variances de position, certes moins mesurables expérimentalement, mais d'un haut intérêt pour la compréhension des processus, on trouve différents régimes de non-uniformité :

- quand $\eta < 1/80$ environ, l'écoulement est quasi-uniforme,
- quand $1/80 < \eta < 1/40$ environ, l'hypothèse d'uniformité globale ne tient plus ; l'hypothèse d'uniformité locale peut être d'un certain secours,
- quand $1/40 < \eta < 1/20$ environ, il est nécessaire de prendre en compte le gradient de vitesse moyenne autour de la trajectoire moyenne. L'écoulement est déjà fortement non uniforme,
- au-delà de $1/20$, des ordres supérieurs de séparation d'échelle entrent en jeu, et doivent être pris en compte.

Le premier seuil de $1/80$ à partir duquel la non-uniformité se manifeste est étonnamment petit. De plus, l'hypothèse d'uniformité locale ne tient plus dès que l'échelle globale de non-uniformité dépasse quelques dizaines de longueurs de corrélation (cas $\eta = \lambda/\mathcal{L}_\infty = 1/34$). Cette conclusion peut d'avérer contraignante dans des cas concrets.

Le transport au voisinage de flux extrêmement hétérogènes comme des puits de pompes ou d'injection d'eau, risquent d'emblée de mettre les modèles à rude épreuve.

3.2.3 Simulation en écoulement radial convergent

Dans cette partie, nous allons simuler un domaine rectangulaire au sein duquel se trouve un puits de pompage. La solution analytique en milieu 2D infini homogène en régime permanent a servi à construire les conditions aux limites de charge sur les bords extérieurs du domaine. Afin de relever l'importance du type de pompage, un rabattement donné ou un rendement fixe ont été imposés alternativement au niveau du puits. Les simulations ont été effectuées avec $\sigma_y = 0.5$ ou 1 et, à chaque fois, trois particules ont été lâchées à des distances croissantes du puits : 10λ , 20λ et 30λ . Le domaine a d'abord été dimensionné pour obtenir une région centrale suffisamment étendue pour contenir les panaches de particules, et raisonnablement à l'abri des conditions aux limites. 16λ de largeur parurent suffisant. Les champs de perméabilité ont été construits par la méthode des bandes tournantes, avec une discrétisation à mailles carrées de côté $\lambda/5$.

Une première analyse a consisté en l'étude statistique des grandeurs cinématiques le long des axes médians du domaine, dont on peut trouver les détails dans [Maugis 1997b]. En voici les conclusions :

1. Les deux premiers moments ponctuels de la charge et de la vitesse dépendent essentiellement :
 - de leur moyenne d'ensemble, ou, dans une même mesure, de leur valeur en champ homogène,
 - de la nature et la proximité des zones à variable imposées (puits et conditions aux limites),
 comme si l'écoulement était localement uniforme. Cette observation ne s'applique cependant pas aux corrélations spatiales de vitesse, qui semblent très affectées par la non uniformité de l'écoulement moyen, ainsi que par les conditions aux limites, comme cela a été mentionné §2.
2. La charge et la vitesse longitudinale se comportent, à l'approche du puits, de la même façon qualitative qu'à l'approche d'une condition à la limite aval en écoulement uniforme.
3. En dehors de ces modifications locales, l'écoulement peut être considéré comme localement uniforme du point de vue des statistiques ponctuelles. Par contre, on ne peut rien dire des auto-corrélations de vitesse à séparation non nulle, qui régissent les propriétés du transport.

3.2.3.1 Moments de position particulière

Le puits de pompage a un impact important sur les variances de position. Les trois particules lâchées montrent des caractéristiques qualitativement identiques. C'est pourquoi on ne présente les résultats que pour celle lâchée initialement le plus près du puits.

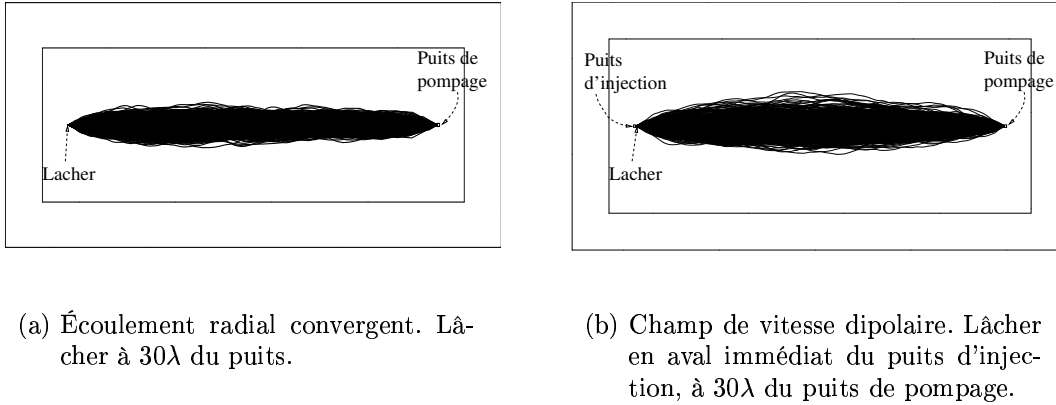


FIG. 3.7: Panaches de particules en milieu hétérogène obtenus pour un point de lâcher en présence de puits. On a superposé les trajectoires obtenues par convection pure pour chacune des 2000 réalisations équiprobables de champ de perméabilité.

Les courbes de Monte-Carlo de X_{ij} (Fig. 3.8a et c) sont exploitables jusqu'à mi-chemin avant que trop de particules n'aient atteint le puits et faussé les statistiques. Elles montrent que la variance de position longitudinale X_{11} augmente environ deux fois plus vite que la prédiction à l'ordre zéro. De plus, la variance de position transverse X_{22} est fortement inférieure à sa prévision avec les mêmes hypothèses, puisqu'elle présente un maximum, avant d'amorcer une érosion distincte (Fig. 3.8c). Il est raisonnable de penser que, en accord avec la forme de cigare du panache (Fig. 3.7a), X_{22} devrait atteindre 0 au niveau du puits.

Il n'est pas surprenant que le modèle à l'ordre zéro coïncide avec l'hypothèse d'écoulement uniforme, puisque, comme il a été dit (§3.1.1 et §3.1.2), les variances de position dans ces deux modèles ne dépendent pas de la norme de la vitesse de Darcy - extrêmement variable - mais de ses changements d'orientation seuls, qui sont inexistants dans le cas présent. Il faut, pour être efficace, prendre en compte le gradient de vitesse le long de l'axe longitudinal à tout le moins.

Ce faisant, le modèle à l'ordre un s'ajuste remarquablement aux résultats de simulation, quelle que soit la distance de lâcher. Il rend compte à la fois de l'allongement du panache, et de l'annulation de sa largeur au point de pompage. Cet accord valide *a posteriori* une hypothèse sous-jacente faite §3.1.3 et difficile à justifier *a priori*, à savoir la stationnarité de la corrélation de vitesse normalisée ; du moins pour $\sigma_y < 1$.

L'étude de plusieurs points de lâcher permet de distinguer l'impact du choix de la condition à la limite au niveau du puits de pompage. L'effet sur la dispersion longitudinale est d'autant plus élevé, mais reste faible, que le point de lâcher est proche du puits. X_{11} en présence d'un rabattement imposé dépasse ainsi la valeur obtenue avec un débit de pompage fixe, conformément à ce qui peut être observé si l'on imposait ce même type de condition en amont et en aval d'un écoulement

uniforme (Cf. chapitre 2).

3.2.3.2 Courbe de restitution

Les prédictions à l'ordre zéro ou un s'appuient sur la trajectoire moyenne qui s'arrête, par définition, à $t = \langle t_p \rangle$, le temps moyen d'arrivée au puits. Cette trajectoire n'est plus définie au-delà de ce temps, raison pour laquelle les estimations ne sont définies qu'avant ce moment.

L'estimation de la courbe de restitution (Fig. 3.8e) par ces deux modèles est mauvaise, avec toutefois une légère amélioration avec l'ordre un, en ce qu'ils sous-estiment fortement l'étalement des temps d'arrivée. Cette mésestimation ne peut s'expliquer par le calage de la dispersion longitudinale, qui est bon. Elle provient plus probablement de la non-gaussianité de position, sur laquelle s'appuie pourtant le calcul de la distribution de t_p , à l'approche du puits. Cet effet certain s'explique pleinement et simplement si l'on songe que les abscisses accessibles aux particules sont limitées par l'abscisse du puits.

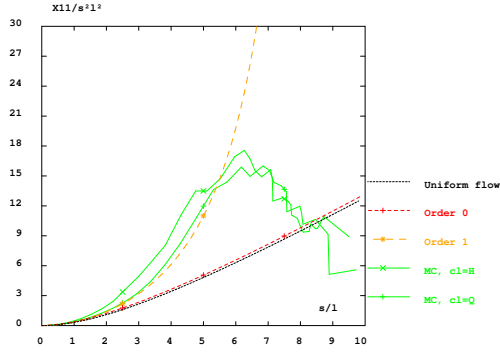
D'un autre côté, la courbe de restitution prévue par le modèle d'écoulement uniforme – choisi de façon à honorer le temps moyen d'arrivée – donne un excellent calage. Cette observation confirme ce que Lenda et Zuber avaient mentionné longtemps auparavant [Lenda et Zuber 1970]. Ainsi, du strict point de vue de la courbe de restitution, qui est aussi l'observation expérimentale naturelle d'un test de traçage sous pompage, le modèle uniforme équivalent se révèle très efficace. Ce résultat sera interprété un peu plus loin en termes opérationnels.

Enfin, à l'instar des variances de position et autant que le permet la mauvaise qualité de sa courbe, le temps d'arrivée n'apparaît pas dépendre du type de condition imposée par le puits (Fig. 3.8e).

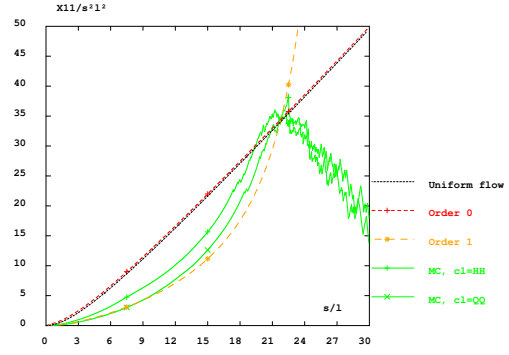
3.2.3.3 Conclusion sur l'écoulement radial convergent

La présence d'un puits de pompage a une forte influence à la fois sur les moyennes des variables cinématiques, mais aussi sur la structure de leurs fluctuations. A cela s'ajoutent les effets des conditions aux limites externes et l'impact du type de puits (rabattement ou débit imposé). De nombreux points en commun ont été mis en évidence avec l'écoulement homogène, dont l'étude préalable s'est révélée très profitable à cet égard. La comparaison s'est montrée valide en général, sauf pour la dispersivité transverse à proximité du puits. En dehors de ces artefacts, l'hypothèse d'écoulement localement uniforme (ordre zéro de la séparation d'échelles) sied à la prédiction des moyennes et variances des variables cinématiques.

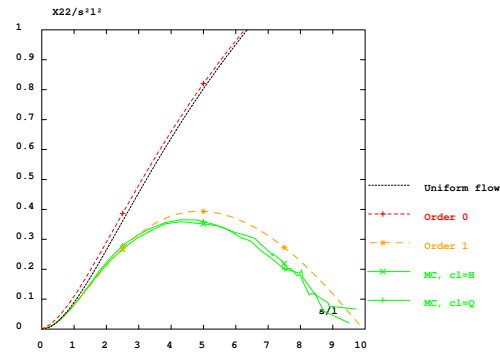
L'utilité du modèle à l'ordre zéro ne s'étend pas aux moments de position particulière, prouvant qu'en fait, l'écoulement autour d'un puits n'est pas réellement



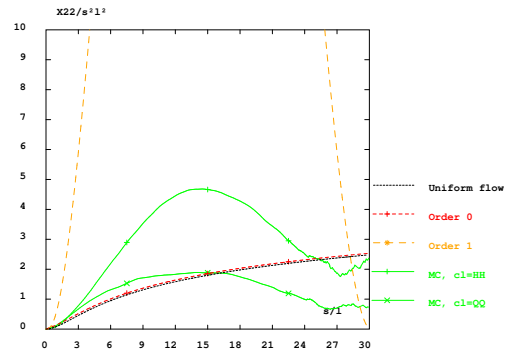
(a) Variance de position longitudinale



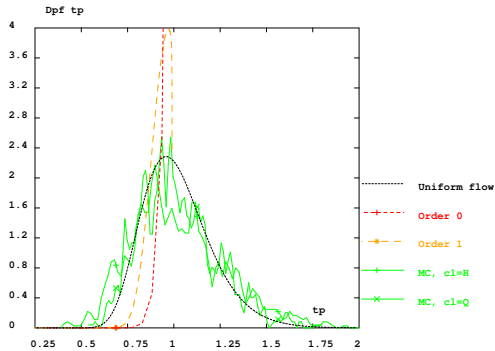
(b) Variance de position longitudinale



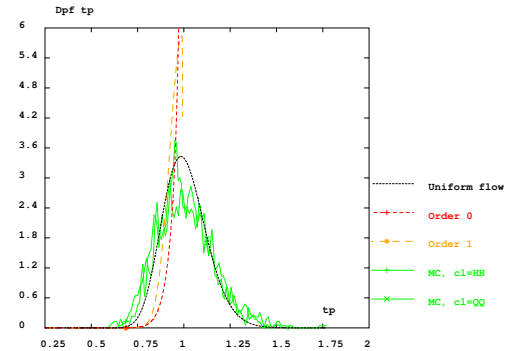
(c) Variance de position transverse



(d) Variance de position transverse



(e) Distribution du temps d'arrivée



(f) Distribution du temps d'arrivée

FIG. 3.8: Statistiques du transport pour un lâcher (à gauche) à 10λ d'un puits de pompage, et (à droite) à angle 0° en écoulement dipolaire. Les mentions H ou HH signifient des puits à charge imposée, et Q ou QQ des puits à débit imposé. L'ordre 1 de la séparation d'échelle tient compte des variations de vitesse moyenne autour de la position moyenne de particule. L'ordre 0 ne tient compte que des changements d'orientation de la vitesse moyenne.

uniforme localement ; en tout cas pas d'un point de vue du transport. Par contre, le modèle à l'ordre un donne une estimation excellente de la dispersion d'ensemble. C'est une heureuse surprise compte tenu de la non-uniformité extrême de ce type d'écoulement.

Cependant, la courbe de restitution nous rappelle qu'il ne suffit pas de connaître les deux premiers moments d'une variable pour la connaître totalement si elle n'est pas gaussienne. Cette dernière hypothèse s'est révélée inappropriée car la distribution de position est fortement distordue à l'approche du puits, du fait notamment qu'aucune abscisse particulière ne peut dépasser l'abscisse du puits.

Toutefois, l'hypothèse d'écoulement uniforme se montre très efficace pour caler la courbe de restitution, et ce, avec les bons paramètres physiques. Il ne faut rien déduire de ce modèle du point de vue des vitesses et de l'étalement du panache, mais les propriétés stochastiques du milieu σ_y et λ déduites de cette façon d'un test de traçage sous pompe devraient en principe être valides.

3.2.4 Simulation en écoulement dipolaire

On ajoute au cas précédent un puits d'injection d'eau de même force que le puits d'exhaure, toute chose restant égale par ailleurs. Cette fois-ci, toutefois, le point de lâcher de particule est sur l'axe de symétrie, à l'aval immédiat du premier puits, face au second. Contrairement au cas radial convergent où n'importe quel point de lâcher est également représentatif de tout autre à distance égale du puits, la trajectoire moyenne, dans le cas dipolaire, dépend étroitement et fortement de la position angulaire du point de lâcher autour du puits d'injection. Un traceur libéré dans ce puits se répartit en principe tout autour, et moyennant les contributions de toutes les trajectoires moyennes possibles, y compris celle s'éloignant indéfiniment du second puits.

Le choix d'un seul point de lâcher est à la fois d'ordre méthodologique, et d'ordre pratique. En effet, un seul point de lâcher permet de se concentrer sur une seule trajectoire moyenne, pour laquelle le modèle d'ordre un que nous avons présenté est conçu, sans poser la question de la combinaison représentative des contributions de toutes les trajectoires moyennes envisageables. Il faudrait peut-être quelques centaines de particules à lâcher par réalisation, ce que nos moyens informatiques ne nous permettent pas. De plus, les temps de parcours sont potentiellement très grands et donc coûteux pour certains points de lâcher, notamment ceux situés à l'opposé du puits de pompage, ce qui nécessiterait d'introduire un "angle de coupure" arbitraire au-delà duquel on ne tiendrait plus compte des particules.

Enfin, pas plus que pour l'écoulement radial convergent ou même tournant, on ne saurait, du fait de la non stationnarité stochastique des écoulements non uniformes (et donc leur non-ergodicité), interpréter sans risque la variance de position d'une particule comme indicateur direct de l'étalement d'un panache initialement non ponctuel.

Afin d'illustrer cette contrainte, nous avons sélectionné un deuxième angle de lâcher à 45° et proposé une convolution simpliste des deux signaux.

L'impact du choix de la condition imposée aux puits (rabattement ou débit imposé) sur les grandeurs cinématiques s'est avéré, sans surprise, très similaire à celui observé pour un puits unique. C'est pourquoi nous ne reviendrons pas dessus.

3.2.4.1 Moments de position

Les résultats de Monte-Carlo montrent que la variance de position longitudinale en écoulement dipolaire est inférieure à celle obtenue en radial convergent d'un facteur deux environ (Fig. 3.8b). De son côté, la dispersion transverse lui est supérieure de presque un ordre de grandeur. Ces deux observations s'expliquent aisément par la nature divergente de l'écoulement dans le demi-plan d'injection. Le premier effet découle ainsi du deuxième : par rapport à la trajectoire moyenne, les particules s'écartant latéralement rencontrent des champs de vitesse de norme inférieure et orientée transversalement. Les fluctuations de position le long de l'axe 1 sont ainsi partiellement absorbées par celles le long de l'axe 2.

Dans le deuxième demi-plan, l'écoulement redevient convergent et, comme dans l'exemple à un seul puits, la variance de position transverse montre une tendance vers zéro, quoique la qualité des simulations ne permette pas de conclure de façon catégorique (Fig. 3.8d).

Une fois encore, et pour la même raison, l'hypothèse de séparation d'échelle à l'ordre zéro n'apporte pas d'amélioration à celle d'un écoulement uniforme. Toutes deux surestiment légèrement X_{11} – dans la mesure où les simulations autorisent une comparaison – sans retrouver la tangente à l'origine. Elles sous-estiment sévèrement X_{22} dans la première moitié du parcours.

Passer à l'ordre un de la séparation d'échelle donne par contre, comme avec un seul puits, un bon calage de X_{11} . La variance de position transverse X_{22} , de son côté, est prévue avec la bonne tangente à l'origine, mais surestimée d'un ordre de grandeur au moins par rapport aux simulations. Il semble qu'ici, le modèle surestime le gradient transverse de vitesse transverse $\partial_2 U_2$. En effet, le modèle à l'ordre un suppose que le gradient de vitesse moyenne est constant autour de la trajectoire moyenne, alors qu'en réalité, il diminue sensiblement lorsque la trajectoire aléatoire s'en écarte. Pour compenser cet effet, il faudrait prendre en compte des ordres supérieurs dans le développement de Taylor de la vitesse dans l'équation (3.3), avec ce que cela sous-entend de lourdeur analytique.

3.2.4.2 Courbe de restitution

Cette fois encore, l'approximation d'écoulement uniforme (choisi de façon à honorer le temps moyen de sortie) se révèle très efficace dans l'estimation de la distribution des temps d'arrivée (Fig. 3.8f). Les autres modèles plus sophistiqués souffrent des

même restrictions que pour l'écoulement radial convergent.

Afin d'explorer le devenir, non plus d'une seule particule, mais d'un panache, la distribution des temps d'arrivée d'une seconde particule lâchée à 45° a été simulée, et moyennée simplement avec la précédente (Fig. 3.9).

Comme il fallait s'y attendre, les temps d'arrivée pour ce second lâcher sont plus tardifs, plus dispersés, et avec une probabilité maximale plus faible. La distribution moyennée est, de ce fait, presque deux fois plus large, avec une moyenne plus élevée et un maximum plus bas. On peut déduire qualitativement de cela l'allure de la courbe de restitution d'un panache complet, défini à $t = 0$ par un nombre infini de points de lâcher également distribués autour du puits d'injection. Par rapport à la seule particule lâchée sur l'axe de symétrie, elle serait substantiellement plus étalée, avec un temps moyen peut-être deux fois plus long. La prévision du modèle uniforme serait-elle encore de si grande qualité ? Ceci devrait être approfondi, mais serait difficile à réaliser, en pratique, car cela requerrait théoriquement un domaine infini, à moins de limiter arbitrairement la zone angulaire considérée. Lâcher 10 particules entre 0 et 120° représenterait déjà un effort informatique considérable que nous n'avons pas entrepris.

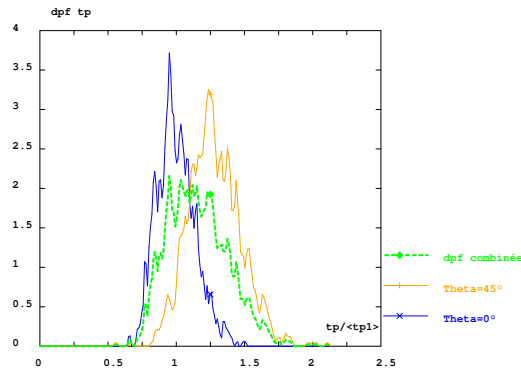


FIG. 3.9: Distribution du temps d'arrivée d'un panache (pointillé) simulé par deux points de lâcher (lignes continues)

3.2.4.3 Impact de la condition à la limite de puits

Si l'on s'appuie sur le résultat concernant un unique puits de pompage, on doit attribuer au puits d'injection seul la responsabilité de la discrimination apportée par le choix du type de condition de puits sur la dispersion transverse, et sur la dispersion longitudinale dans une moindre mesure (Fig. 3.8d). On reconnaît l'effet d'une charge imposée en amont sur X_{11} (Cf. chapitre 2), mais l'effet sur X_{22} , bien qu'indubitable, demeure inexpliqué.

3.2.4.4 Conclusion sur l'écoulement dipolaire

L'étude de l'écoulement et du transport dans un contexte dipolaire confirme et complète le fruit de l'analyse de l'écoulement radial convergent.

L'influence du choix des conditions aux limites aux puits (débit ou charge fixé) sur les deux premiers moments ponctuels de charge et de vitesse est la même que le puits injecte ou prélève de l'eau. Ce choix se fait grandement ressentir sur la dispersion transverse, et légèrement sur la dispersion longitudinale. Cet effet n'est pas à négliger car la dispersion transverse est responsable en grande partie de la dilution d'un panache, ou inversement la superficie que l'on pense avoir dépolluée par ce procédé au bout d'un certain temps. Pour dépolluer une plus grande surface, il vaut donc mieux imposer des rabattements que des débits. C'est en tout cas une lecture possible des résultats présentés.

La méthode de séparation d'échelle à l'ordre un, par opposition aux deux autres modèles qui ne donnent que des ordres de grandeur pas toujours qualitativement corrects, s'est montrée utile pour estimer la variance de position longitudinale. La variance de position transverse échappe elle aux prévisions des trois modèles, et nécessite de plus grands efforts analytiques, compliqués de surcroît par la prise en compte nécessaire de la condition à la limite au puits d'injection. Seul le modèle à l'ordre un respecte la symétrie du problème, mais se trompe d'un ordre de grandeur dans l'estimation de X_{22} .

La distribution des temps d'arrivée pour un point de lâcher unique est plus resserrée qu'avec le seul puits de pompage, mais elle ne s'applique pas à un panache complet, lâché également tout autour du puits d'injection. On doit s'attendre, dans ce dernier cas, à une distribution plus étalée et retardée.

Conclusion

Cette étude de l'écoulement et du transport pour trois types différents d'écoulement non uniforme dans des champs de perméabilité stationnaires, par méthode de Monte-Carlo et aussi analytiquement, a permis d'aller plus loin dans la compréhension des mécanismes stochastiques des écoulements hydrogéologiques.

Les champs de vitesse ont été générés par des choix *ad hoc* des conditions aux limites. L'effet de ces dernières sur les variables cinématiques et de transport est qualitativement similaire à ce qu'on a pu observer en écoulement uniforme (Cf. §2). De ce point de vue, des puits à débit imposé se comportent comme des frontières amont ou aval de vitesse imposée en écoulement uniforme. La variance de position transverse y constitue une exception notable en ce qu'elle est insensible au type de puits de pompage, mais très sensible au type de puits d'injection. Des rabattements imposés aux puits donnent une meilleure dispersion transverse que des débits fixés.

Du fait même de leur non-uniformité, les écoulements étudiés ne sont pas stationnaires. Cela signifie qu'on ne peut déduire directement le comportement d'un panache non ponctuel – ce qui est particulièrement le cas à l'issue d'un puits d'injection – à partir des caractéristiques de transport d'un seul point de lâcher. Il est nécessaire d'effectuer une convolution que nous n'avons fait qu'ébaucher. Toutefois, l'hypothèse d'uniformité locale est valide pour ce qui est des moyennes et variances des grandeurs cinématiques.

Pour ce qui est de la question principale abordée par cet exposé, à savoir l'existence d'une dépendance de la dispersion avec le type d'écoulement, nous avons fait la preuve que le transport en est fortement affecté. L'écoulement tournant s'est révélé précieux car il permet d'explorer continûment des niveaux de non-uniformité croissante. Si l'on définit, lorsque c'est possible, un coefficient de séparation d'échelle par le rapport entre la longueur de corrélation stochastique (de la perméabilité, dans notre cas) et la longueur caractéristique de non-uniformité, des valeurs aussi faibles que $1/40$ suffisent pour qu'on ne puisse plus considérer l'écoulement comme uniforme. Au-delà, on peut considérer, sans apport remarquable, l'écoulement localement uniforme, ou mieux, prendre en compte à l'aide d'un modèle à l'ordre un de la séparation d'échelle, les gradients de vitesse moyenne. Cette démarche a un certain succès pour les écoulements modérément tournants ainsi qu'en présence de puits, avec l'exception de la dispersion transverse en présence d'un puits d'injection. Augmenter l'ordre de prise en compte de la séparation d'échelles pourrait repousser les limites d'application de la théorie un peu plus loin, mais l'effort analytique nécessaire reste quelque peu dissuasif.

Actuellement, le seul modèle raisonnable qui puisse prendre en compte de façon globale et complète la structure stochastique d'un écoulement arbitraire est la simulation de Monte-Carlo. Elle a cependant ses propres défauts qui sont, entre

autres, des conditions aux limites déterministes, des imprécisions intrinsèques – faibles cependant – liées à la discrétisation, et le coût du temps CPU.

Paradoxalement, au milieu de toutes ces réserves, l'hypothèse d'écoulement uniforme tire son épingle du jeu, alors que c'est elle qui était sur la sellette au départ de cette étude. En effet, la courbe de restitution d'un puits de pompage, avec éventuellement un puits d'injection, fournie par un écoulement uniforme honorant le temps moyen d'arrivée, se cale remarquablement sur les courbes simulées. En d'autres termes, on peut probablement interpréter (quoique cela n'ait été démontré que pour un point de lâcher sur une trajectoire rectiligne) un test de pompage ou de dipôle à l'aide d'un modèle d'écoulement uniforme en vue d'en déduire les propriétés stochastiques de la perméabilité comme σ_y ou λ . Lenda et Zuber, en leur temps, avait mentionné une telle possibilité [*Lenda et Zuber 1970*]. Cette façon de faire occulte cependant les processus de transport comme les covariances de position. La dispersivité, si on la définit comme la dérivée curviligne de ces variances, est par contre très différente suivant les types d'écoulement. On fait ainsi une erreur importante en voulant, par exemple, utiliser en écoulement uniforme une dispersivité calée sur un test de pompage par une méthode traditionnelle. La notion de dispersivité asymptotique, par exemple, n'existe pas en présence de puits : la dispersion longitudinale tend vers l'infini alors que la dispersion transverse tend vers zéro, ce qui, on en conviendra, évacue la dispersivité comme variable intrinsèque à un milieu. Ma recommandation en la matière est, au mieux, de s'en tenir à des notions de dispersion ou de faire des produits de convolution sur une dispersivité instationnaire, et au pire, à envisager une écriture des équations de transport qui s'en détache complètement.

Troisième partie

Algorithmes et méthodes numériques

Chapitre 4

Modélisation numérique particulière de convection-dispersion

Préambule

La modélisation du transport en milieu poreux par méthode lagrangienne a profité d'améliorations significatives. Labolle et al. (2000) préconisent, afin de permettre l'étude de milieu très contrastés voire discontinus, une estimation spatialement semi-implicite de la fraction de saut diffusif (qui s'ajoute au saut convectif explicite). De plus, la question de la non-gaussianité des processus dispersifs, développée au chapitre 3, remet en cause directement l'écriture de la dispersion sous forme d'équation de diffusion. On observe notamment des courbes de restitution très dissymétriques et à queues très longues, caractéristiques de diffusion non-fickienne ou anormale [*Chin et Wang 1992 ; Moroni et Cushman 2001 ; Berkowitz et al. 2002*]. Addison (2000) propose une extension de la méthode lagrangienne pour traiter ce type de problèmes, à l'aide de mouvement brownien fractionnel où les sauts aléatoires sont corrélés entre eux.

Résumé

Nous présentons dans cette partie un travail sur l'implémentation dans le code Cast3M de modèles de transport particulière par convection, dispersion et diffusion. Il s'appuie sur la formulation Éléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH) pour l'écoulement et la définition des caractéristiques, mais l'algorithme est en fait indépendant du type d'éléments finis.

La traversée d'une maille se fait pas plusieurs sauts consécutifs par paire de sauts convectifs puis diffusifs. Ce modèle prend en compte des faces imperméables au transport et est applicable aux milieux hétérogènes. Il est compatible avec tout type de formulation de la vitesse, puisqu'il suffit qu'on puisse estimer celle-ci en des points quelconques. Mais la précision de calcul des trajectoires dépend évidemment de celle de la vitesse; la préférence allant notamment vers des vitesses à divergence nulle, et à interpolation linéaire [*Schafer-Perini et Wilson 1991*], ce qui est d'emblée le cas avec des EFMH.

Le principe de localité de l'algorithme, par calage exact du pas de temps pour retomber sur les faces traversées, permet de s'affranchir d'éventuelles accumulations de particules aux interfaces entre zones à fort contraste de diffusion.

Introduction

La modélisation du transport de polluant constitue une étape de base à des applications innombrables en milieu poreux. De plus, la similitude mathématique de l'équation de convection-diffusion avec d'autres processus physiques (mécanique, transport de chaleur, par exemple) accentue l'intérêt pratique de proposer des méthodes de résolution. La méthode eulérienne a un certain succès, mais, comme on le verra au chapitre 5.2, il peut s'avérer difficile de satisfaire tous les critères de précision. En particulier, les situations à fort Peclet requièrent, si l'on veut éviter une diffusion numérique trop importante, une discrétisation spatiale très fine afin de satisfaire au critère numérique sur la diffusion, mais sans rapport avec l'intensité de la convection. Il en résulte des calculs très lourds, d'autant plus que le pas de temps doit être diminué corrélativement. De plus, une résolution eulérienne exige de résoudre l'équation de transport en chaque maille, alors que la zone intéressante ou gagnée par l'élément transporté peut être beaucoup plus petite.

La méthode lagrangienne, qui consiste à suivre une ou plusieurs particules dans ses évolutions le long des lignes de courant [*Kinzelbach 1988* ; *Tompson et al. 1987*], peut apporter une alternative. Cette méthode est en fait très souple, dans la mesure où l'on peut attacher aux particules tout un ensemble d'informations, comme son poids, sa charge, sa nature, etc. La prise en compte de la sorption est possible par l'usage d'une formulation récursive à l'aide d'un indicateur mobile/immobile variable suivant une loi de probabilité [*Mishra 1997* ; *Mishra et Gutjahr 1997*]. Une synthèse récente à propos de ces méthodes lagrangiennes vient d'être publiée [*Delay et al. 2005*].

Notre manière de prendre en compte la diffusion fickienne s'inspire des travaux de [*Semra 1994*] avec néanmoins des différences de taille. A l'origine, Semra s'est intéressé à des milieux homogènes et la méthodologie qu'il propose pour franchir les interfaces en est, d'une certaine façon, un héritage historique. Il intègre dans la vitesse d'advection une contribution du gradient de dispersion, et pour ce qui est du saut aléatoire, une probabilité inégale de franchissement des interfaces entre mailles. De notre côté, nous voulons développer une méthode qui prenne en compte d'emblée la possibilité de fortes hétérogénéités. Bien que nous conservions l'hypothèse de diffusion-convection constante par maille, ce qui est somme toute cohérent avec le choix de discrétisation, nous prenons pour principe la localité de l'algorithme. C'est-à-dire que le transport d'une particule dans une maille commence et finit dans cette maille, et dépend exclusivement des propriétés dans la maille. On espère ainsi s'affranchir des problèmes induits par la

discontinuité de la diffusion-dispersion. Pour ce faire, on abandonne la méthode de réflexion avec un pas de temps inchangé, et on la remplace par une méthode sans réflexion mais avec ajustement du pas de temps pour retomber pile sur une interface.

Cet algorithme de résolution d'une équation de convection-diffusion-dispersion (sous l'hypothèse fickienne) par méthode particulaire a été implémentée dans notre code Cast3M (enrichissant l'opérateur 'TRAJ' existant), dans le cadre d'une résolution préalable d'un écoulement permanent par des Éléments Finis Mixtes Hybrides. Il peut être aisément adapté à d'autres types d'interpolation. Nous le présentons en première partie. La méthode fait l'objet d'un faisceau de tests de validation analytiques, qui sont présentés en deuxième partie. Enfin, la troisième partie montre des simulations intéressantes qualitativement pour mettre à l'épreuve la robustesse de l'algorithme, dont un cas-test de bistrat.

4.1 Présentation et implémentation du modèle

Nous présentons ici l'algorithme mis en place pour représenter le déplacement d'une particule sous l'effet de la convection et de la diffusion. Nous nous attarderons sur les principes essentiels de réalisation de l'algorithme afin d'apporter une vision et une compréhension globale du modèle que nous avons implémenté dans Cast3M. Nous présentons tout d'abord l'algorithme général puis nous détaillons cet algorithme en indiquant les différents cas à distinguer et comment nous les traitons.

4.1.1 Algorithme général convection-diffusion particulaire

L'algorithme proposé est décrit synoptiquement Fig. 4.1.

4.1.2 Trajectoire au sein d'un même élément

4.1.2.1 Modélisation d'un saut de particule

Pour calculer la trajectoire d'une particule au sein d'un élément, on ajoute, au déplacement déterministe convectif, une fluctuation aléatoire due à la dispersion et à la diffusion (Fig. 4.2). Pour écrire ce deuxième terme, on rassemble toutes les contributions aléatoires à caractère diffusif dans un coefficient de diffusion effective, supposé constant sur la maille.

La partie convective tient compte de la variation linéaire de la vitesse au sein d'une maille. Deux méthodes ont été envisagée.

Tout d'abord une méthode "pousse-pousse", segmentant la traversée de chaque maille en un certain nombre de segments sur lesquels la vitesse est constante, égale à sa valeur en tête de segment. C'est une méthode par intégration spatiale explicite avec, en pratique, une faible discrétisation. Elle marche bien tant que le champ de

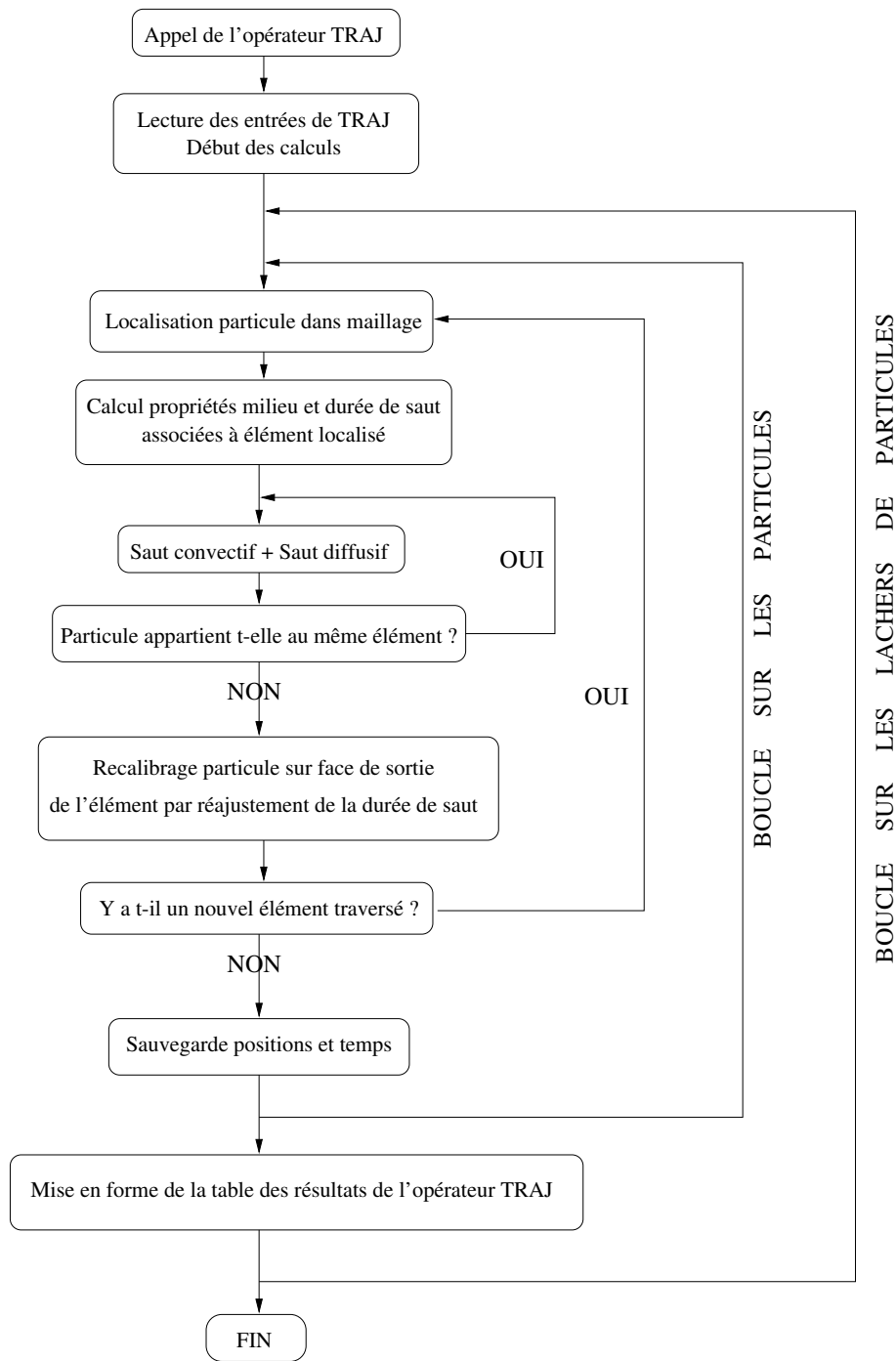


FIG. 4.1: Algorithme du modèle particulaire implémenté

vitesse ne varie pas brutalement au sein d'une maille ; ce qui signifie qu'elle nécessite que la discrétisation spatiale soit adaptée au champ de vitesse.

La deuxième méthode consiste en une intégration analytique de la vitesse sur l'élément, qui donne, en fonction du point d'entrée, directement le point de

sortie. On utilise alors les fonctions d'interpolation analytiques pour chaque type d'élément. Un seul saut a lieu par maille avec une très bonne précision [Pollock 1988].

Vis-à-vis de l'adjonction d'un second terme aléatoire, cette dernière méthode est inapplicable car on ne retombe plus sur une face de la maille après avoir ajouté un saut diffusif. Si, alors, on cherche à obtenir des sauts convectifs partiels, tout l'intérêt de la méthode tombe puisqu'elle est surtout utile pour sa rapidité à franchir les éléments d'un seul saut. Dans une telle application, cette deuxième méthode s'avère plus longue, et pas plus précise que la première munie d'un nombre de sauts convectifs suffisant.

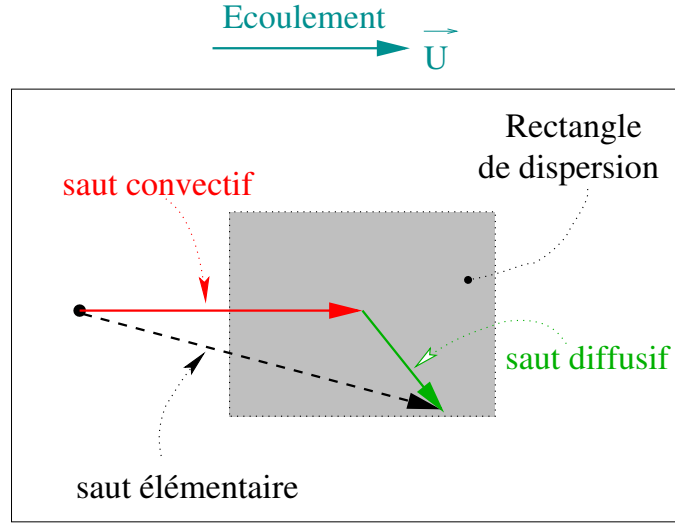


FIG. 4.2: Représentation du transport d'une particule par convection-diffusion, par séparation des processus.

4.1.2.2 Saut convectif

Dans ce qui suit et pour la simplicité de l'exposé, nous nous plaçons dans le cas académique où \vec{U} est à la fois la vitesse de Darcy et la vitesse microscopique, en supposant entre autres que la porosité vaut 1. Il est aisé, du fait de la localité de l'algorithme à la maille courante, de diviser la vitesse de Darcy par la porosité, supposée constante par élément. On fait ainsi le choix d'une méthode avec sauts multiples et partiels au sein de chaque maille (Fig. 4.3). Ceci donne, avec un schéma explicite :

$$\vec{X}(t + \Delta t) = \vec{X}(t) + \vec{U}(\vec{X}(t)) * \Delta t \quad (4.1)$$

où $\vec{X}(t)$ représente la position particulaire au temps t , $\vec{X}(t + \Delta t)$ la position au temps $t + \Delta t$ et $\vec{U}(\vec{X}(t))$ représente la vitesse au point $\vec{X}(t)$. Pour déterminer $\vec{U}(\vec{X}(t))$, la formulation EFMH est utilisée.

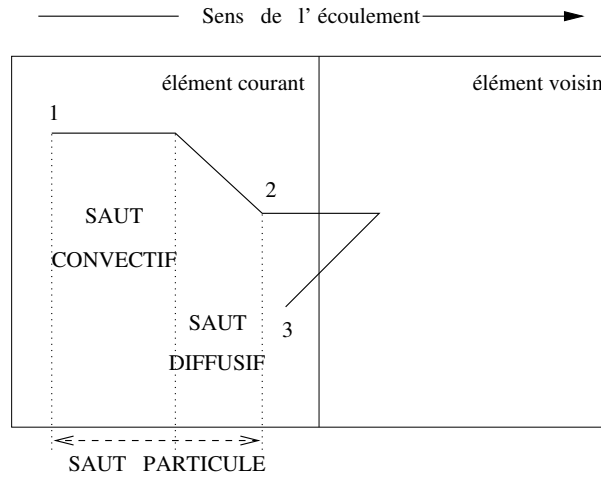


FIG. 4.3: Saut de particule au sein d'un élément

Pour obtenir la vitesse en chaque point où cela est nécessaire, on fait un aller-retour dans l'élément de référence, pour y estimer la vitesse à partir des fonctions de base, qui sont alors faciles à mettre en oeuvre. La transformation permettant de passer d'un élément déformé (par exemple, un quadrangle quelconque) à l'élément de référence (dans le cas du quadrangle, un carré de côté 1 orienté d'une certaine façon) est une opération classique. Les fonctions de base, quant à elles, dépendent du type d'élément (triangle, carré, prisme, etc.) et du type d'interpolation des éléments finis. Ici, les EFMH prévoient une variation linéaire de la vitesse au sein de éléments, ce qui donne

$$\vec{q}_h(\vec{X}_{ref}) = \sum_{j=1}^{Nf} q_j * \vec{w}_j(\vec{X}_{ref}) \quad (4.2)$$

où \vec{X}_{ref} est la position dans l'élément de référence associée à $\vec{X}(t)$, \vec{w}_j sont les fonctions de base, et q_j les débits aux faces.

Pour passer de la vitesse dans l'élément de référence $\vec{q}_h(\vec{X}_{ref})$ à la vitesse dans l'élément réel, nous effectuons le changement de variable suivant [Dabbene et Martin 1994] :

$$\vec{U}(\vec{X}(t)) = \frac{1}{\det J} * J * \vec{q}_h(\vec{X}_{ref}) \quad (4.3)$$

avec J la matrice Jacobienne de la transformation, et $\det J$ le Jacobien associé.

4.1.2.3 Saut dispersif

Pour le saut dispersif, nous nous appuyons sur une approche stochastique. Nous utilisons les relations issues de l'équation de Fokker-Plank-Kolmogorov et du modèle de Uffink [Uffink 1990 ; Mosé 1990 ; Semra 1994] :

$$\vec{X}(t + \Delta t) = \vec{X}(t) + P L \vec{\omega} * \sqrt{\Delta t} \quad (4.4)$$

avec :

- P la matrice de passage du repère lié à la vitesse vers le repère absolu, c'est-à-dire l'ensemble, en colonnes, des coordonnées de la nouvelle base exprimées dans l'ancienne.
- L la matrice telle que $L = \sqrt{6D}$, pour autant qu'on puisse se permettre cette écriture simplifiée. Dans son repère principal (la nouvelle base), L s'écrit de la manière suivante :

$$L = \begin{pmatrix} \sqrt{6D_L} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6D_T} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6D_T} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

où $D_L = \alpha_L \|U_C\| + d_p$ et $D_T = \alpha_T \|U_C\| + d_p$ sont les composantes du tenseur de diffusion effective,

avec α_L et α_T les dispersivités, supposées constantes par élément ; d_p la diffusivité en milieu poreux – que l'on appellera abusivement "diffusion porale" (porosité \times facteur de forme \times diffusivité moléculaire), supposée également constante par élément ; et U_C la vitesse moyenne de Darcy sur l'élément, correspondant, en EFMH, en son estimation au centre de la maille.

- $\vec{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ un vecteur dont chaque composante ω_i est un nombre aléatoire issu d'une loi uniforme entre -1 et 1.

En définitive, dans le repère absolu, le déplacement particulaire obéit aux expressions suivantes, qui ne sont autres que l'équation de Fokker-Plank-Kolmogorov, écrite avec une diffusion constante par élément :

$$\begin{cases} X(t + \Delta t) = X(t) + U_x \Delta t + \left(\omega_1 \sqrt{6D_L} \frac{U_x}{\|U\|} - \omega_2 \sqrt{6D_T} \frac{U_y}{U_{xy}} - \omega_3 \sqrt{6D_T} \frac{U_z U_x}{U_{xy} \|U\|} \right) \sqrt{\Delta t} \\ Y(t + \Delta t) = Y(t) + U_y \Delta t + \left(\omega_1 \sqrt{6D_L} \frac{U_y}{\|U\|} + \omega_2 \sqrt{6D_T} \frac{U_x}{U_{xy}} - \omega_3 \sqrt{6D_T} \frac{U_z U_y}{U_{xy} \|U\|} \right) \sqrt{\Delta t} \\ Z(t + \Delta t) = Z(t) + U_z \Delta t + \left(\omega_1 \sqrt{6D_L} \frac{U_z}{\|U\|} + \omega_3 \sqrt{6D_T} \frac{U_{xy}}{\|U\|} \right) \sqrt{\Delta t} \end{cases} \quad (4.6)$$

où $U_{xy} = U_x^2 + U_y^2$.

4.1.2.4 Durée de saut

Pour le modèle implémenté, nous avons choisi de fixer une durée de saut de façon à ce que la particule effectue en moyenne au moins 5 sauts par élément. Ce choix nous a paru être un bon compromis entre temps et précision de calcul. Il est cohérent avec l'hypothèse d'un raffinement spatial en rapport avec les variations de vitesse. Au sein de chaque élément, la durée de saut est initialement choisie de la façon suivante :

$$\Delta t = \frac{1}{5} \min \left(\frac{L_e}{\|U_C\|}, \frac{L_e^2}{6 * \max(D_L, D_T)} \right) \quad (4.7)$$

où L_e est le plus petit diamètre de l'élément. Cette estimation est une simple fraction de la plus petite des longueurs caractéristiques de convection et de diffusion. De cette manière, on pense faire entre 3 et 10 sauts par maille suivant sa forme, et le hasard.

4.1.3 Trajectoire entre deux éléments

S'il n'y avait qu'une seule chose à retenir de notre démarche, c'est que la traversée d'un élément vers un autre élément au cours d'un pas de temps élémentaire est proscrite : le saut de particule se fait toujours au sein d'un même élément.

Pourquoi faire ce choix ? Parce que deux éléments voisins peuvent avoir des propriétés différentes (vitesse, coefficients de dispersion) et les valeurs utilisées pour le calcul du saut telles que D_L , D_T ou encore \vec{U} (voir plus haut) dépendraient alors des deux éléments à la fois.

Ainsi, dès que la particule va d'un élément A vers un élément B , le pas de temps Δt est modifié de façon à ce que la particule arrive sur une face de l'élément A . Elle repart alors d'une face de l'élément B (face commune aux deux éléments).

On voit donc qu'en procédant de la sorte, tout saut de particule dépend des propriétés d'un seul élément à la fois. Par conséquent, le modèle s'affranchit des problèmes de non dérivabilité (vitesse par exemple) qui peuvent exister aux interfaces des éléments. En contrepartie, le coût calculatoire est un peu plus élevé.

Pour recalibrer Δt afin que la particule arrive exactement sur la face qu'elle aurait dû traverser, il suffit de résoudre une équation du second degré en $\sqrt{\Delta t}$ ci-dessous :

$$[\vec{U}(\vec{X}(t)) \cdot \vec{n}_f] \Delta t + [(P L \vec{\omega}) \cdot \vec{n}_f] \sqrt{\Delta t} = \overrightarrow{MF} \cdot \vec{n}_f \quad (4.8)$$

avec \vec{n}_f un vecteur normal unitaire à la face initialement traversée ; M le point de départ de la particule (avant le saut) ; et F un point quelconque (pour nous, le point milieu) appartenant à la face initialement traversée (quel que soit $F \in \text{face}$, $\overrightarrow{MF} \cdot \vec{n}_f = \text{cste}$).

Pour obtenir la nouvelle position de la particule sur la face de l'élément, on calcule le saut de particule de manière classique mais avec le Δt issu de la résolution de l'équation (4.8) (Fig. 4.4).

4.1.4 Trajectoire aux abords de limites imperméables

Afin de modéliser la filtration, ou bien pour offrir des commodités de modélisation, il est utile de pouvoir prendre en compte des frontières imperméables aux particules sans être toutefois nécessairement imperméable à l'eau. L'extension du modèle à ce type de surface est assez naturelle à partir du moment où l'on a traité le rebond de

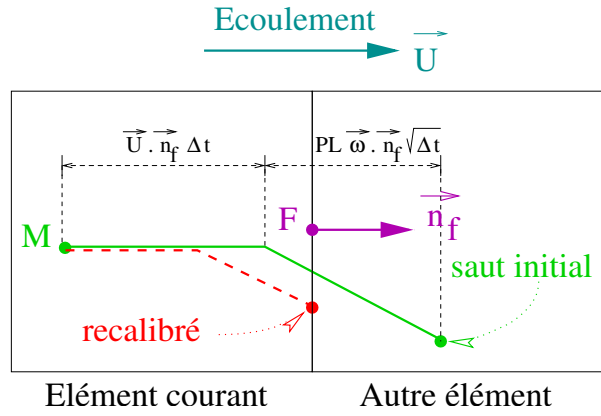


FIG. 4.4: Recalibrage de la position de la particule sur une face de l'élément

particules sur des faces. On applique ainsi les principes suivants lorsqu'une particule devrait normalement traverser une face imperméable (Fig. 4.5) :

- Saut convectif : à partir du point d'intersection avec la face imperméable, on ne conserve que la composante tangentielle de la vitesse.
- Saut dispersif : il y a réflexion totale sur le bord imperméable.

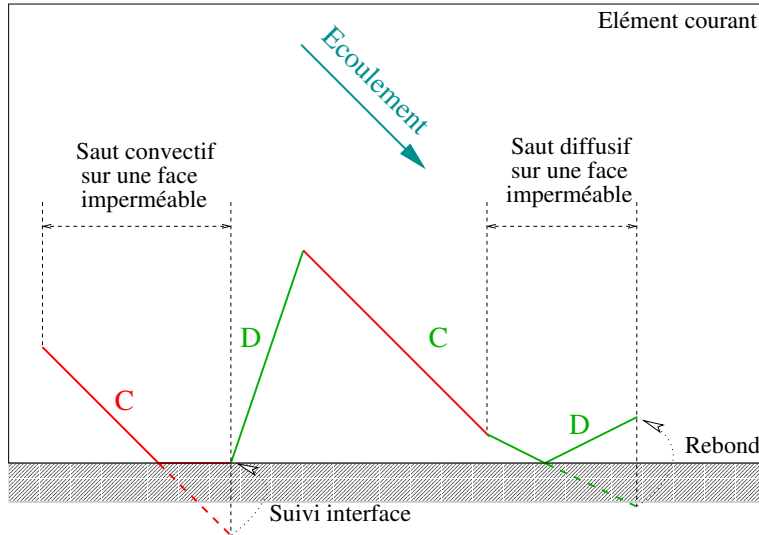


FIG. 4.5: Saut de particule aux abords d'une face imperméable

4.1.5 Traitement des cas particuliers

Les deux premiers cas particuliers où la trajectoire s'arrête sur un noeud (en 2D ou 3D) ou sur une arête (en 3D) font appel à une méthode classique que l'on rappelle ici. Le recalibrage de la particule sur une face lorsque son double-saut l'entraîne

en dehors de l'élément constitue par contre l'élément original et fondamental de l'algorithme. Il est abordé ensuite.

4.1.5.1 La trajectoire passe par un noeud ou par une arête

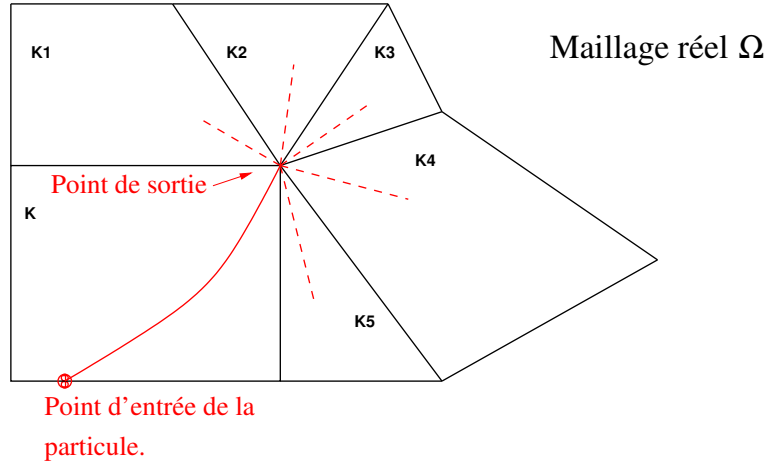


FIG. 4.6: Lorsque la trajectoire de la particule passe par un noeud on ne sait pas dans quelle maille se rend la particule.

Dans ce cas, on ne sait pas dans quelle maille se rend la particule. On donne alors à la particule une petite impulsion purement convective, sur la base de la vitesse dans l'élément d'où l'on vient, pour voir où la convection l'entraînerait normalement (Fig. 4.7). C'est dans cette nouvelle maille, qui peut être la maille d'origine également, que démarrera l'algorithme. Peu importe si, au cours du saut diffusif qui suit, la particule s'avère se diriger vers une autre maille, car ce cas de figure sera traité normalement.

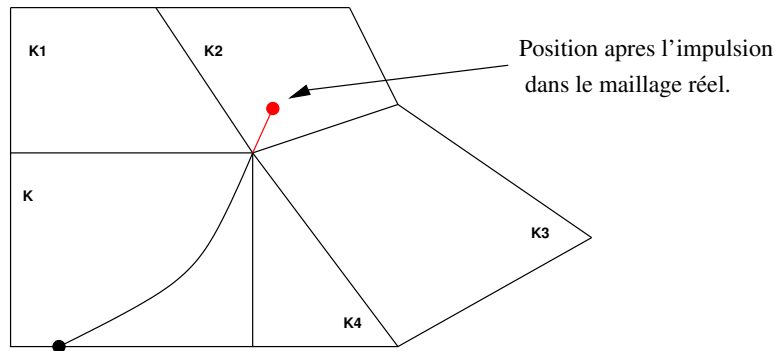


FIG. 4.7: Pichenette décisive

4.1.5.2 Recalibrage de la position de la particule sur une face

L'équation du second degré (4.8) en $\sqrt{\Delta t}$ a une solution tant que le point de départ de la particule est à l'intérieur de l'élément et le point d'arrivée à l'extérieur. Cependant, la résolution de cette équation ne permet pas d'affirmer que la particule se situera toujours sur une face de l'élément. En effet, il existe les cas particuliers dont il faut tenir compte :

- La particule rencontre une autre face après recalibrage : comme le montre la figure 4.8, l'algorithme doit prendre en compte la nécessité de plusieurs recalibrages successifs éventuels.
- La particule est recalibrée en dehors de l'élément : comme la figure 4.9 le montre, il arrive parfois que la résolution de l'équation (4.8) ne converge pas vers une solution correcte (même après recalibrages successifs, la position de la particule ne varie plus). Dans ce cas, seul le saut convectif est recalibré sur une face de l'élément de façon à ce que la particule revienne au sein de la maille au cours du saut diffusif. On espère que le saut suivant posera moins de problèmes.

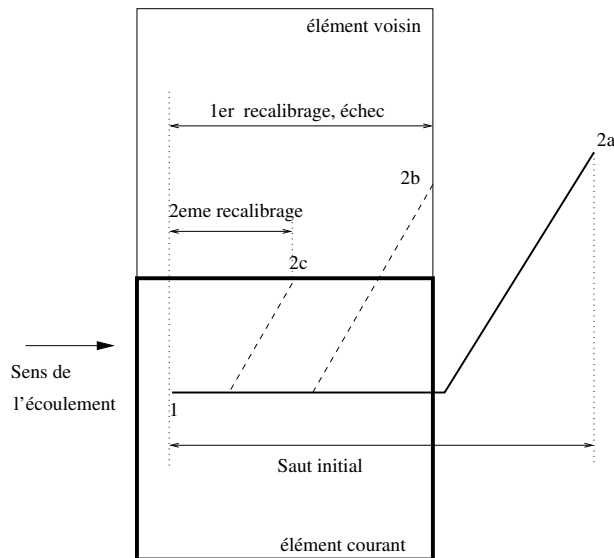


FIG. 4.8: Recalibrages successifs du saut de particule sur une face de l'élément

Ce sont les seuls cas particuliers où un traitement exceptionnel est nécessaire pour l'algorithme de ce modèle afin que les particules partent et arrivent toujours sur des interfaces d'éléments.

4.1.6 Conclusion

Cette présentation de l'algorithme nous permet de prendre conscience des avantages essentiels de ce modèle. En effet, toutes les "itérations" quelles qu'elles soient pour le calcul de trajectoires se font toujours au sein d'un même élément. Ainsi, à partir du moment où les propriétés du milieu sont continues au sein des éléments, le

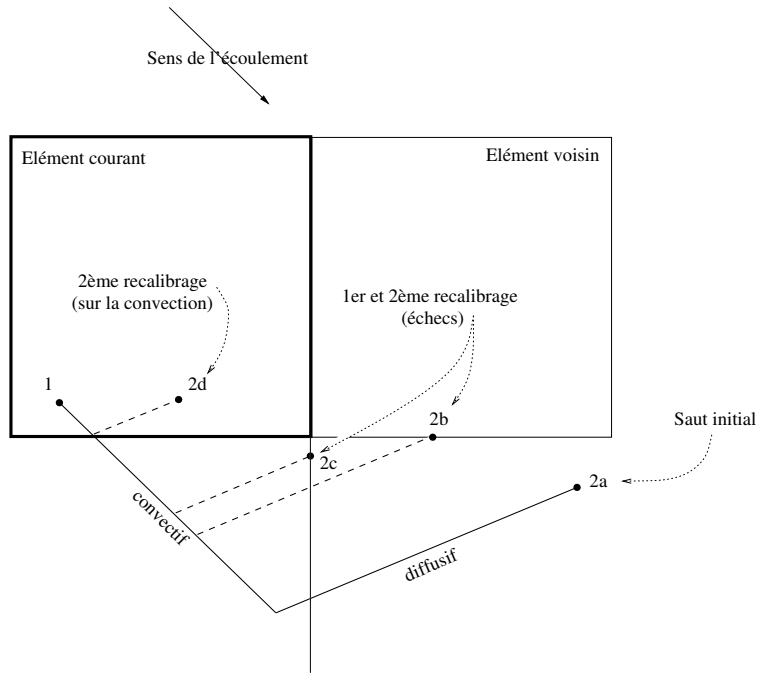


FIG. 4.9: Cas d'un recalibrage du saut de particule en dehors de l'élément

modèle n'a pas à traiter des cas complexes d'hétérogénéité et de non dérivabilité qui peuvent exister généralement aux interfaces des éléments.

Il nous reste maintenant à vérifier la pertinence du modèle et la cohérence de l'algorithme par l'intermédiaire de cas tests et de simulations.

4.2 Validation du modèle au regard de solutions analytiques

Dans cette partie, nous mettons à l'épreuve de solutions analytiques le modèle et l'algorithme dans des cas de complexité croissante. Après avoir explicité la solution théorique, nous aborderons les cas de convection seule, diffusion seule, puis convection-dispersion ensemble.

4.2.1 Statistiques théoriques du transport en écoulement uniforme

Pour valider le modèle implémenté, nous allons utiliser l'approche stochastique dans les cas de transport par convection-dispersion et par diffusion pure [Dagan 1989 ; Semra 1994 ; Gardiner 1990]. En effet, le saut diffusif s'effectuant aléatoirement par sauts indépendants selon une loi uniforme, la position de la particule peut valable-

ment être considérée comme une variable aléatoire. C'est-à-dire que des lâchers de particules à partir d'un même point constituent autant de réalisations aléatoires de position. Les statistiques calculées sur ce panache pour des temps de transport donnés sont donc égales aux moments d'ensemble correspondants à la variable position. La propriété d'ergodicité d'une diffusion homogène permet d'identifier la densité de probabilité de position avec la concentration d'un panache de nombreuses particules, lâchées en une seule fois depuis le même point, pour laquelle nous disposons d'une solution analytique. Ces questions sont exposées en détail dans le chapitre 3 dans la cas de la dispersion, où la diffusivité effective est proportionnelle à la vitesse.

L'équation de transport d'un champ de concentration s'écrit avec nos hypothèses

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}(\vec{U}C) - \text{div}(\overline{\overline{D}}\vec{\nabla}C) = q \quad (4.9)$$

dont la solution pour un lâcher ponctuel est, en choisissant, pour simplifier l'écriture, les axes selon les directions principales du tenseur de diffusion :

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{\left(\sqrt{4\pi t/\varepsilon}\right)^n} \frac{1}{\sqrt{\det \overline{\overline{D}}}} \exp \left[- \sum_{i=0}^n \frac{{}^t(\vec{X} - \vec{X}_0 + \vec{U}t/\varepsilon) \overline{\overline{D}}^{-1} (\vec{X} - \vec{X}_0 + \vec{U}t/\varepsilon)}{4t/\varepsilon} \right] \quad (4.10)$$

avec i le numéro de composante ; C_0 , la concentration initiale ; D_i les termes diagonaux du tenseur de dispersion, homogènes ; \vec{U} , le vecteur vitesse de Darcy, ici égal à la vitesse microscopique ; \vec{X}_0 le point de lâcher ; n , la dimension du problème.

Sous l'effet de la diffusion, la position de particule est à chaque instant gaussienne, ce qui permet d'identifier, dans l'équation (4.10), les moyenne et écart-types de position :

$$\begin{cases} \langle \vec{X} \rangle = \vec{U}t/\varepsilon + \vec{X}_0 \\ \langle x_i^2 \rangle = 2D_i t/\varepsilon \end{cases} \quad (4.11)$$

avec successivement $\langle \vec{X} \rangle$, la moyenne statistique ; \vec{x} , la fluctuation ; et $\langle x_i^2 \rangle$ la variance statistique de la composante i du vecteur position. Ce sont ces deux relations auxquelles nous allons maintenant comparer les résultats de simulation.

4.2.2 Validation de la convection pure

Nous abordons brièvement le cas de la convection pure, testée sur des configurations d'écoulement uniforme sur des maillages irréguliers ou obliques, ainsi que dans le cas d'un puits de pompage convergent et d'une chicane. Les résultats obtenus en terme de trajectoires et de temps de parcourt sont très satisfaisants.

La précision par rapport à une méthode analytique globale par élément est même meilleure dans les écoulements uniformes, car on fait l'économie de la transformation

d_{ini}	Δd	$\Delta d/d_{ini}$ (%)	d_{min}	d_{max}	$[\frac{d_{min}+d_{max}}{2} - d_{ini}]/d_{ini}$ (%)
0.4	0.016764	4,19	0.39292	0.4032	0,47
0.6	0.004461	0,74	0.59362	0.6032	0,26
0.8	0.010053	1,26	0.79154	0.8015	0,44

TAB. 4.1: Précision du calcul sur trajectoires circulaires après un tour.

d_{ini} : distance initiale par rapport au centre, Δd : variation entre les rayons de départ et d'arrivée, d_{min} et d_{max} : rayon minimal et maximal respectivement.

élément réel / élément de référence. Ainsi, le problème de calcul de la matrice Jacobienne de cette transformation ne se pose pas.

Nous avons voulu effectuer une autre simulation avec un écoulement circulaire. Pourquoi ? Parce que, compte tenu de son interpolation en EFMH, la vitesse reste constante au sein de chaque élément. Le critère d'un tour complet parfait permet de juger de la qualité des erreurs d'arrondi et de l'algorithme indépendamment des erreurs d'approximation de la vitesse. On doit l'idée de ce cas-test à F. Dabbène [Communication personnelle].

Nous considérons un domaine carré maillé irrégulièrement, et de demi-côté de longueur unité. En chaque point le module de la vitesse est égal à la distance au centre (Fig. 4.10a). Au temps 2π , chaque particule doit être revenue à sa position initiale après avoir décrit un cercle (Fig. 4.10b).

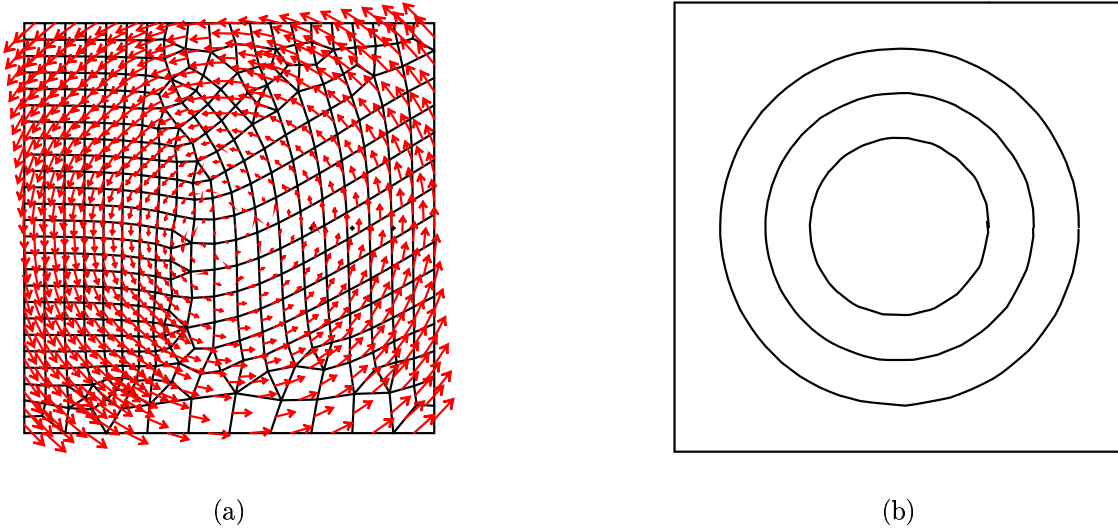


FIG. 4.10: Champ de vitesse 2D circulaire et trajectoires calculées

La précision des trajectoires est portée sur le tableau 4.1. L'erreur n'est pas toujours faible, notamment aux faibles rayons de lâcher (4,19 %) où la vitesse varie

comparativement vite. On voit là l'importance de l'écriture explicite du saut par convection qui utilise $\vec{U}(\vec{X}(t))$ pour calculer la position d'arrivée $\vec{X}(t + \Delta t)$. Or dans le cas où les vitesses sont différentes d'un point à un autre, \vec{U} peut beaucoup varier entre $\vec{X}(t)$ et $\vec{X}(t + \Delta t)$, les erreurs sur la position peuvent alors se cumuler. Dans un cas comme celui-ci, il faut imposer un nombre de saut moyen par élément bien supérieur à la valeur par défaut de 5.

Le modèle présenté ici est donc applicable pour la convection pure bien que ce ne soit pas son objectif ultime. Traiter des cas de convection pure dans ce modèle serait surtout utile pour définir une trajectoire moyenne théorique dans les problèmes de trajectoires Monte-Carlo (grand nombre de particules lâchées en un même point). Cependant, dans les cas à forte hétérogénéité de vitesse, il faut imposer un nombre de sauts par élément plus important, ou bien recourir à un modèle semi-analytique.

4.2.3 Validation de la diffusion pure

Nous comparons maintenant les simulations de diffusion pure aux expressions analytiques (4.11). Nous ne présentons pas les résultats en 3 dimensions, qui se sont avérés en tout point similaires aux résultats obtenus en 2D, que nous discutons maintenant.

Nous avons volontairement pris un maillage grossier afin de voir l'impact d'une sous-discrétisation sur la qualité du résultat. Dans un domaine carré 100 m x 100 m maillé régulièrement par des carrés de 10m de côté, sont lâchées 1000 particules au centre d'une maille médiane. Le champ de vitesse est nul et la diffusion est prise constante égale à $0,05 \text{ m}^2/\text{s}$ (cette valeur élevée pour un milieu poreux n'a aucune importance, car elle sert uniquement à donner une échelle de temps). On observe l'évolution au cours du temps des positions de particules jusqu'à $t = 500\text{s}$ (soit un temps adimensionnel $2Dt/L^2 = 1/200$), où toutes les particules sont encore dans le domaine. La moyenne statistique de position doit être constante, et la variance de position (carré de l'étalement) doit croître proportionnellement à D .

L'allure des trajectoires Fig. 4.11 montre que le nuage de particules s'étale dans le temps dans toutes les directions (isotropie de la diffusion).

On constate sur la figure 4.12 de légères oscillations de la position moyenne du panache d'une petite fraction de maille, tout-à-fait acceptables.

Par contre, les résultats en terme de variance de position (Fig. 4.13) sont moins bons que pour les moyennes. Ces variances suivent bien une droite, mais de pente significativement inférieure (environ 17 % plus faible) à ce qui était désiré, malgré que le nombre de particules lâchées soit suffisant d'après une étude de convergence menée en parallèle (Cf. §4.2.4). Notons cependant que la sous-discrétisation spatiale entraîne également une sous-discrétisation statistique de la diffusion, car la longueur de saut moyen (un cinquième de maille, soit 2m) n'est plus assez faible devant la

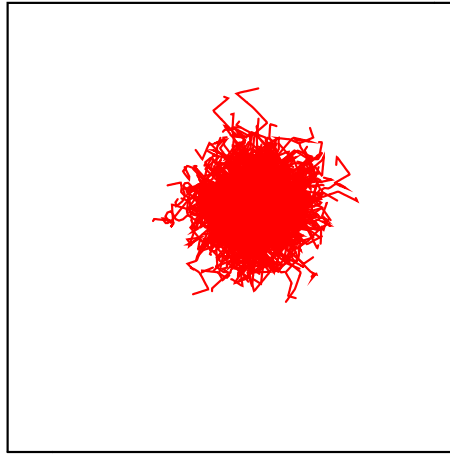


FIG. 4.11: Trajectoires de particules

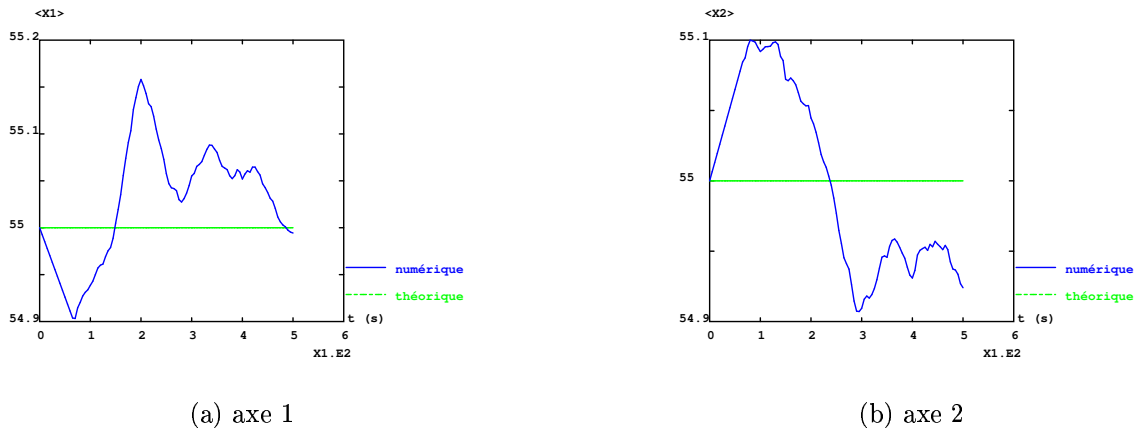
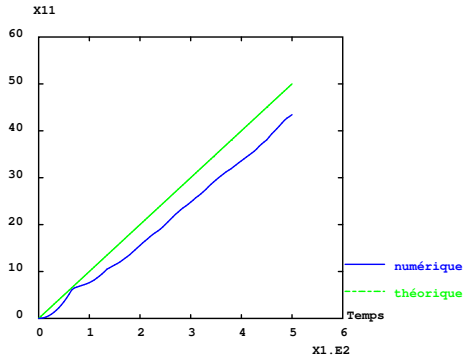


FIG. 4.12: Moyenne statistique de position en fonction du temps. Diffusion 2D avec maillage grossier.

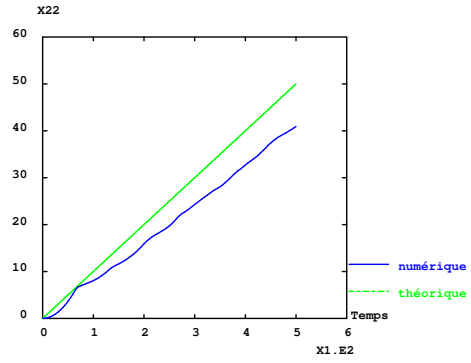
longueur caractéristique de diffusion (pour 500s, environ 7m, soit moins que la taille d'une maille). Deux attitudes sont possibles face à cette difficulté : soit mailler plus finement, soit avoir recourt à une intervention plus spécifique en augmentant le nombre de sauts par maille. Si l'on raffine le maillage d'un facteur 2, et en ajoutant même une difficulté en utilisant un maillage irrégulier, les résultats deviennent très bons (Fig. 4.14)

4.2.4 Validation des phénomènes de convection-dispersion-diffusion

Les test qui suivent prennent en compte à la fois la convection et la dispersion. Notons que lorsque la vitesse est uniforme, la dispersion, écrite comme la dispersivité multipliée par la norme de la vitesse, est mathématiquement équivalente à

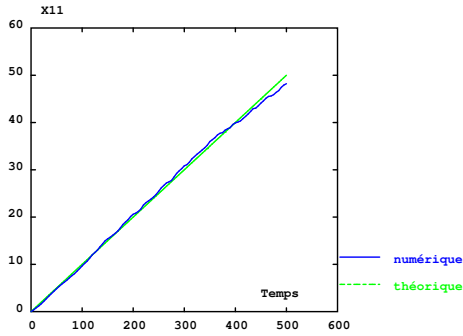


(a) axe 1

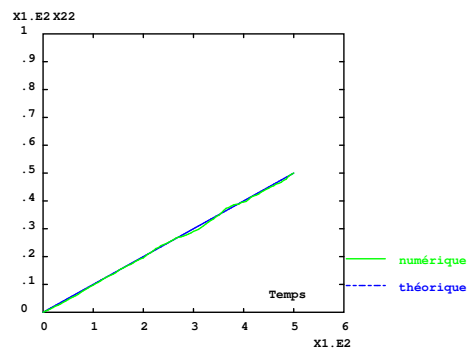


(b) axe 2

FIG. 4.13: Variance statistique de position en fonction du temps. Diffusion 2D avec maillage grossier.



(a) axe 1



(b) axe 2

FIG. 4.14: Variance statistique de position en fonction du temps. Diffusion 2D avec maillage fin

de la diffusion anisotrope. Si nous prenons ici la dispersion, c'est pour valider sa transcription numérique, légèrement différente de la simple diffusion. Encore une fois, nous n'avons pas jugé utile de présenter les résultats 3D, qui n'étaient qu'une redite sans apport nouveau des résultats en 2D.

Nous reprenons le maillage utilisé au paragraphe précédent, mais en le raffinant d'un facteur 10. La maille fait maintenant un mètre de côté. Tout point du domaine est soumis à un écoulement uniforme horizontal de vitesse égale à 1 m/s . Les dispersivités longitudinale et transversale sont respectivement 2 m et 1 m . La diffusion est négligée dans ce problème. Au point de coordonnées $(20.5\text{m}, 49.5\text{m})$ sont lâchées 2000 particules. La simulation s'arrête lorsque toutes les particules sont sorties du domaine. L'équivalent du problème en termes de concentration serait une concentration initiale égale à un Dirac de masse 2000.

Exceptionnellement, nous avons procédé à une étude statistique très exhaustive en considérant les moyennes, les variances, la convergence du transport ainsi que les densités de probabilité marginales. Nous avons pris volontairement un maillage assez fin et un grand nombre de particules lâchées pour amoindrir des écarts entre résultats théoriques et numériques pour des causes de type maillage ou nombre de réalisations insuffisant.

Trajectoire moyenne

Les trajectoires moyennes numérique et théorique (convection pure) sont pratiquement confondues sauf aux abords de la frontière du domaine (Fig. 4.15a). En effet, toutes les particules ne sortent pas en même temps si bien que la représentativité de la moyenne statistique décroît à mesure que le nombre de particules encore présentes diminue. Par conséquent, pour la suite de l'étude de cas, nous ne tiendrons pas compte des derniers temps sauvegardés afin d'assurer une statistique correcte. D'après la figure 4.15, il ne faut pas tenir compte des temps au-delà de 40 s.

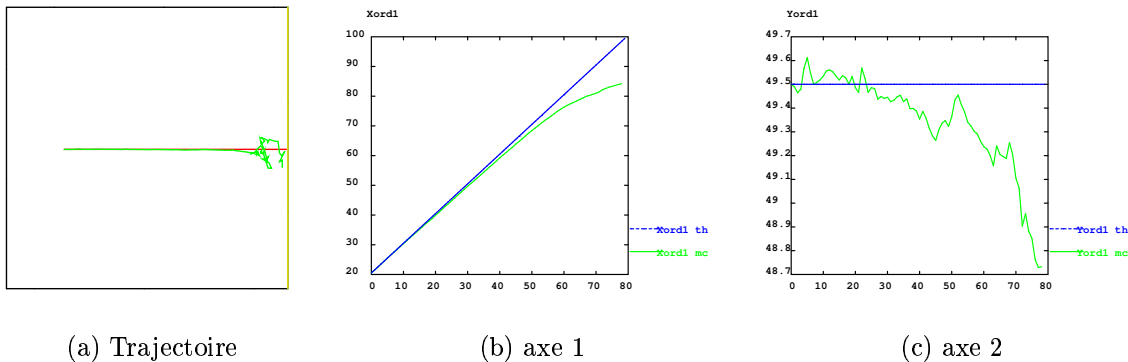


FIG. 4.15: Moyenne statistique de position en fonction du temps, convection-diffusion-dispersion 2D

Dans cet intervalle de temps l'erreur sur la position moyenne, visible Fig. 4.15a et b, reste inférieure à une longueur de maille.

Variance statistique

Les variances de positions offrent ici de bien meilleurs résultats que dans le paragraphe précédent, imputable probablement à la finesse du maillage. L'erreur sur les étalements longitudinal et transverse est d'un sixième de maille seulement après 40 mailles de transport moyen,

Les directions principales du tenseur de dispersion étant x et y , la matrice est diagonale. D'après la relation (4.11), les termes croisés X_{12} doivent donc être nuls en

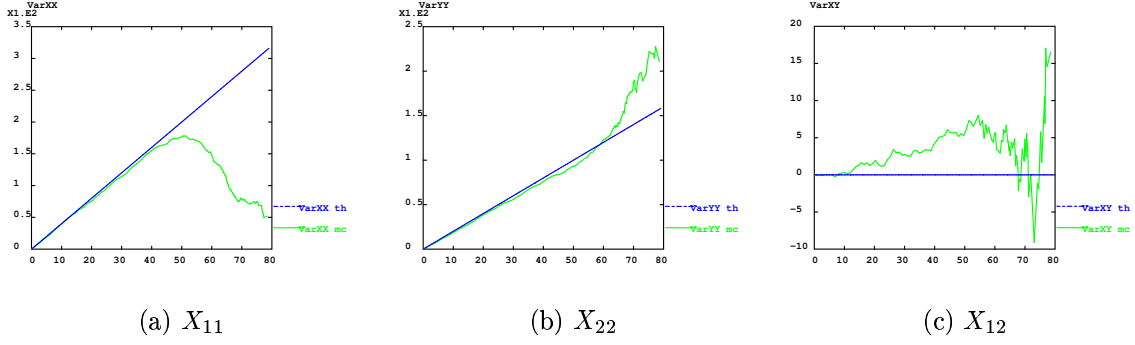


FIG. 4.16: Variance statistique de position en fonction du temps, convection-diffusion-dispersion 2D

théorie. A $t = 40s$, un écart numérique de $5 m^2$ subsiste, acceptable en comparaison avec les valeurs des deux autres auto-covariances.

Ces résultats, déjà très bons, ne s'améliorent pas sensiblement avec un maillage deux fois plus fin (non représenté).

Convergence du transport

L'étude de la convergence des grandeurs statistiques est nécessaire à leur interprétation. Elle permet de discriminer erreur pour non convergence, et biais. La première erreur s'amenuise avec un grand nombre de réalisations, tandis que la seconde démontre le défaut du modèle. A cette fin, nous avons déterminé le nombre minimal de réalisations nécessaires à une convergence satisfaisante. Nous traçons ainsi les convergences des grandeurs statistiques après un temps de parcours de $13s$.

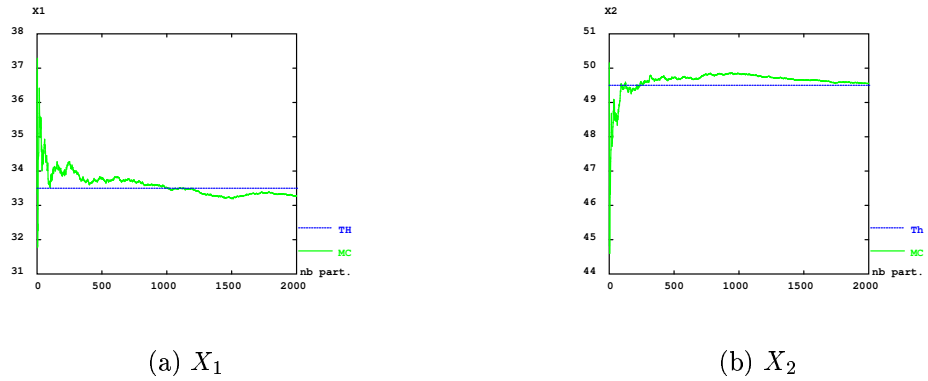
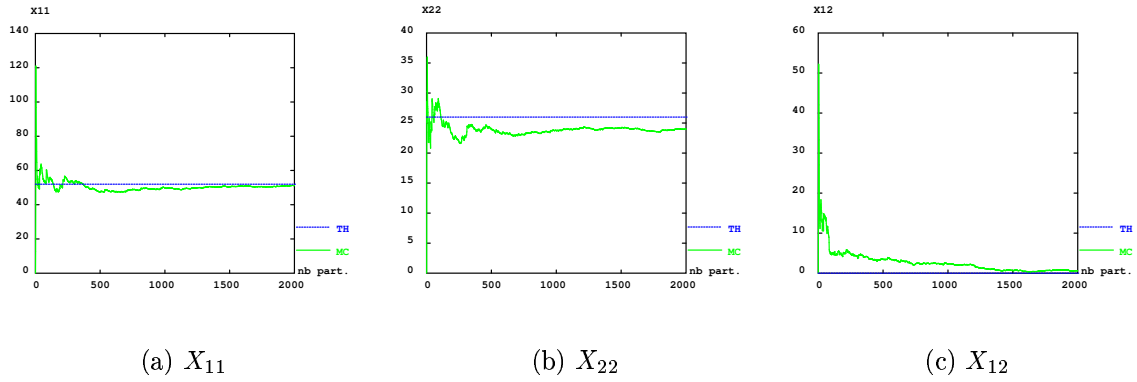


FIG. 4.17: Convergence de la moyenne statistique de position à $t=13s$

Le tableau 4.2 donne un ordre de grandeur du nombre de particules à partir duquel la convergence numérique a été obtenue pour chaque moment statistique, en considérant que la convergence est assurée lorsque l'amplitude des oscillations

FIG. 4.18: Convergence de la variance statistique de position à $t=13s$

Quantité observée	$\langle X \rangle$	$\langle Y \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle xy \rangle$
Nombre de part.	700	600	500	600	450

TAB. 4.2: Nombre de particules nécessaire à la convergence à $t=13s$

ne dépasse plus quelques pourcents.

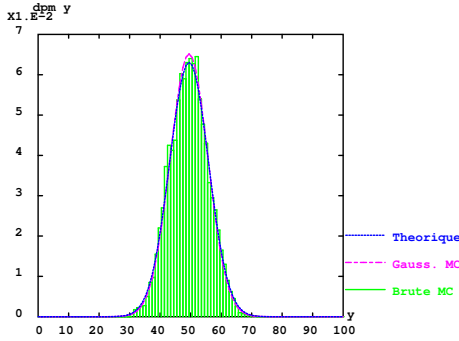
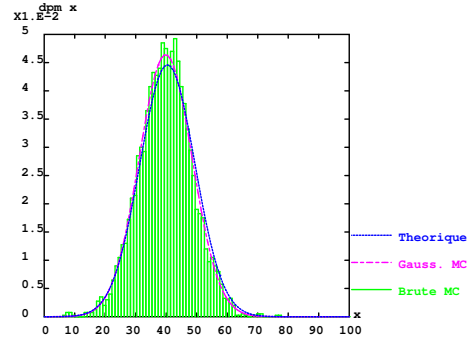
Nous pouvons conclure que 2000 particules lâchées assurent une bonne statistique puisque la convergence est établie assez rapidement dans tous les cas. Cette rapidité vient aussi du fait que le maillage est assez fin (taille des éléments égale à $1/100^e$ du domaine), ce qui augmente d'autant plus le nombre d'itérations pour l'avancée de la particule.

Densités de probabilité marginales

La densité de probabilité de position $f_X(x, y, t)$ est la probabilité, par unité de surface élémentaire, qu'une particule se trouve à l'instant t sur cette unité de surface. $f_X(x, y)dx dy$ est ainsi la probabilité qu'une particule du panache se trouve au temps t au point (x, y) à $dx \times dy$ près. C'est la vraisemblance de la position (x, y) . Pour obtenir la vraisemblance d'une seule de ces coordonnées, indépendamment de l'autre, il suffit d'intégrer $f_X(x, y, t)$. Ainsi, la densité de probabilité marginale $f_X(x, t)$ de X suivant x est l'intégrale de $f_X(x, y, t)$ suivant y . Elle indique la probabilité qu'une particule ait pour abscisse x à dx près. Si X est gaussienne, alors $f_X(x, y, t)$, $f_X(x, t)$, et $f_X(y, t)$ sont des lois normales. C'est ce que nous nous proposons de vérifier présentement, avec $t = 20s$. On présente Fig. 4.19 les lois marginales suivant les deux axes, en y portant :

- les densités théoriques : elles sont directement calculées avec les formules analytiques d'une loi gaussienne centrée sur la moyenne statistique et d'écart-type le carré de la variance statistique. Celles-ci sont obtenues grâce aux relations (4.10) et (4.11) et les diffusions et les vitesses du problème.

- les gaussiennes Monte-Carlo : elles sont directement calculées avec les formules analytiques d'une loi gaussienne ayant la moyenne statistique numérique et l'écart-type statistique numérique. C'est-à-dire que ce sont les courbes précédente, mais établies avec les moyennes et variances trouvées par simulation.
- les densités Monte-Carlo : Le domaine est divisé, du fait de sa discrétisation, en "bandes" horizontales ou verticales de même intervalle. Les densités sont alors calculées simplement en comptant le nombre de particules présentes dans ces "bandes" et en divisant par leur largeur, et sont représentées sous forme d'histogramme.

(a) $dpm_X(y)$ (intégrée suivant x)(b) $dpm_X(x)$ (intégrée suivant y)FIG. 4.19: Densités de probabilité marginales de position à $t=20s$

Toutes les courbes sont pratiquement confondues pour les deux coordonnées. Le nuage de particules "numérique" est donc bien gaussien, conformément à la relation (4.10)).

4.2.4.1 Cas d'un pompage seul

Nous avons considéré un puits de pompage dans un domaine 2D carré 800 m x 800 m dont le maillage est presque régulier et composé d'environ 3600 éléments (quadrangles majoritairement sauf autour du puits). La taille du puits est de 2 m x 2 m et son débit total par unité d'épaisseur vaut $200 \text{ m}^2/\text{s}$. Tout point du domaine n'est soumis qu'au débit imposé par le puits. La diffusion est prise nulle. Les dispersivités longitudinale et transversale valent respectivement 0.5 m et 0.25 m. On peut légitimement discuter le choix de valeurs constantes pour la dispersivité étant donné que l'existence même d'une dispersivité est remise en cause dans ce type d'écoulement, et qu'à tout le moins, elle doit dépendre de la distance au puits (Cf. chapitre 3). N'oublions toutefois pas qu'il s'agit d'un exercice numérique visant à tester le comportement de l'algorithme dans des conditions extrêmes. La présence d'un puits, avec son très fort gradient de vitesse, est à ce titre un élément de vérification particulièrement pertinent. Notons de plus qu'ici, bien que l'on emploie le

mot dispersivité, les sauts dispersifs sont décorrélés entre eux, et ne correspondent en fait tout simplement pas à un processus de marche aléatoire anisotrope et hétérogène. On ne saurait être plus loin du concept de dispersivité tel qu'évoqué en partie 3. Le Lâcher de 1000 particules a lieu au point de coordonnées (-350., -100.). La simulation s'arrête lorsqu'elles ont toutes été absorbées par le puits.

Seule l'étude des positions moyennes a été menée.

Résultat théorique

Ce cas test présente un écoulement non uniforme. Nous pouvons cependant exhiber une solution analytique approximative qui pourra servir de comparaison, ou au moins d'ordre de grandeur, avec les résultats numériques

Pour déterminer cette solution analytique, nous plaçons l'origine au centre du puits et nous utilisons les notations suivantes :

Q_w , le débit total du puits par unité d'épaisseur (m^2/s),

K , la perméabilité (homogène) du milieu (m/s),

r_w , le rayon du puits (m),

\vec{u}_r , un vecteur unitaire radial pointant vers la position moyenne de particule,

R_0 , la distance au puits du point de lâcher (m),

ε , la porosité, qui vaut 1 (*s.d.*).

La position \vec{X} a donc pour norme la distance au puits.

La vitesse centripète de Darcy a la forme simple

$$\frac{\partial \langle \vec{X} \rangle}{\partial t} = \vec{U}/\varepsilon = -\frac{Q_w/\varepsilon}{2\pi \|\langle \vec{X} \rangle\|} \vec{u}_r \quad (4.12)$$

En intégrant cette relation, nous obtenons l'expression de la distance particulière au puits en fonction du temps dans le cas de convection pure :

$$\|\langle \vec{X}(t) \rangle\| = \sqrt{R_0^2 - \frac{Q_w}{\varepsilon\pi} t} \quad (4.13)$$

Elle servira à titre indicatif, car il n'est pas dit que la distance moyenne au puits, avec dispersion, s'y réduise.

Trajectoires

Nous observons bien (figure 4.20) que le puits "pompe" toutes les particules. Le nuage, qui a tendance à s'étaler par dispersion, converge à nouveau vers le puits.

Moyenne de position

Comme on peut le voir Fig. 4.21, les résultats sont très proches de l'estimation sous hypothèse de convection seule, malgré un léger biais négatif qui n'est pas sans rappeler celui qu'on peut observer en écoulement uniforme (Cf. §4.2.4). On ne peut

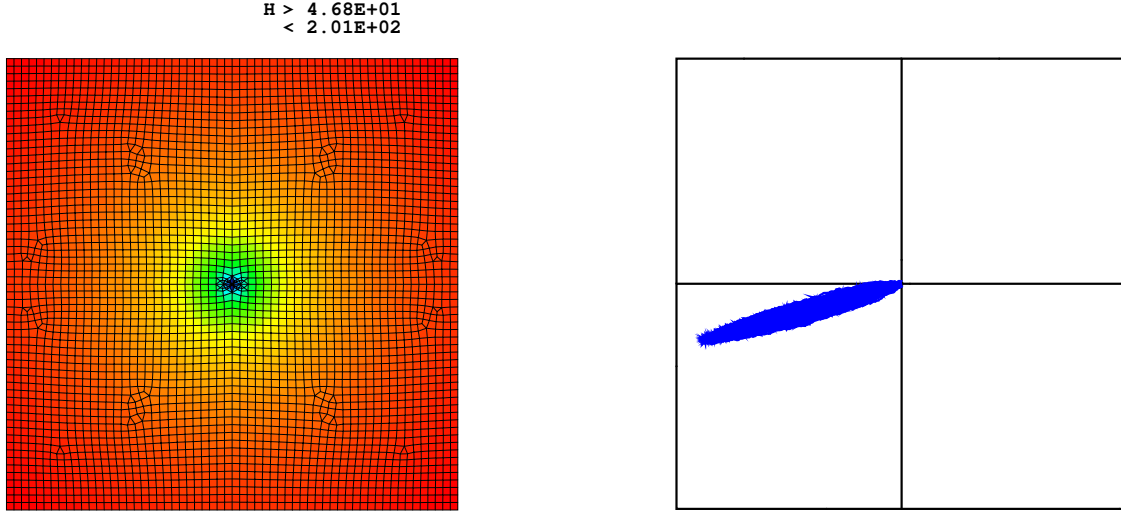


FIG. 4.20: Champ de charge et trajectoires calculées pour un pompage

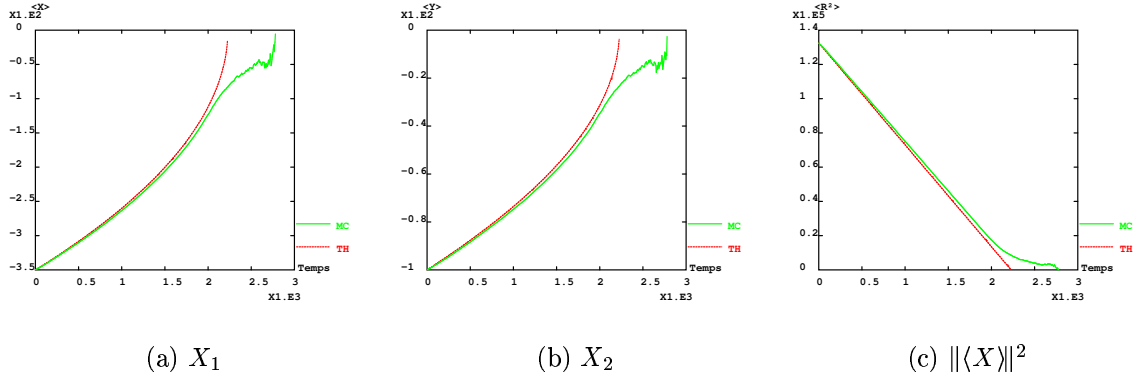


FIG. 4.21: Moyenne statistique de position en fonction du temps ; pompage 2D.

La notation 'MC' désigne les résultats statistiques des 1000 particules et la notation 'TH', la courbe obtenue sous convection seule.

pourtant pas parler ici de validation car on ne dispose pas de solution analytique, bien que l'on serait tenté de dire que l'algorithme de convection-dispersion en écoulement convergent est validé car, à l'instar de la position particulière estimée par méthode stochastique en milieu hétérogène (Cf. §3.2.3.1), la moyenne de position se réduit à la position sans dispersion.

4.3 Autres applications à intérêt qualitatif

Le chapitre précédent a permis de vérifier que le modèle implémenté simulait de manière satisfaisante les phénomènes de convection-dispersion-diffusion au sein d'un milieu poreux.

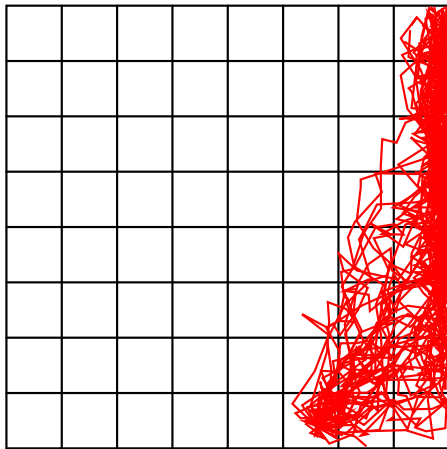
L'objectif de ce chapitre est de présenter d'autres résultats obtenus avec le modèle implémenté qui viennent compléter la validation. Ces résultats restent pour la plupart qualitatifs mais permettent d'apprécier la cohérence entre les simulations effectuées et le comportement réel attendu.

4.3.1 Limite imperméable

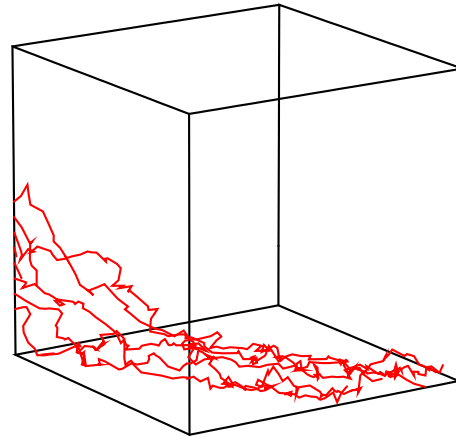
Nous avons tenu compte dans l'algorithme de notre modèle de la présence de barrières imperméables au bord ou au sein du domaine, dont voici quelques exemples.

4.3.1.1 Filtration oblique

Nous considérons un domaine carré de 100 m de côté, avec un maillage régulier grossier. En tout point du domaine, le champ de vitesse est oblique et dirigé vers le bord droit, seul bord imperméable. Les dispersivités longitudinale et transversale sont toutes les deux de 0,1 m et la diffusion porale est de $0,01 \text{ m}^2/\text{s}$. Un lâcher de 50 particules a lieu en amont, proche du bord imperméable (Fig. 4.22a).



(a) Côté imperméable en 2D



(b) Face imperméable en 3D, les particules sont lâchées le long d'une arête.

FIG. 4.22: Prise en compte de faces imperméables

Le cas 3D a seulement 10m de côté, mais est maillé un peu plus finement avec des mailles irrégulières (hexaèdres, prismes et tétraèdres). Le champ de vitesse homogène est oblique et dirigé vers la face inférieure, seule face imperméable. Les dispersivités longitudinale et transversale sont toutes les deux de 0,1 m et la diffusion porale est de $0,001 \text{ m}^2/\text{s}$. 8 particules sont lâchées à partir d'une arête du

domaine cubique (à gauche, sur la figure 4.22b).

On peut voir sur ces deux simulations comment les particules longent la frontière imperméable sans la traverser. Le cas suivant est plus contraignant encore.

4.3.1.2 Cas d'une chicane 2D

Une chicane offre un couloir étroit au sein duquel les particules se bousculent et sont en forte interaction avec les parois. Tout le domaine est maillé, barrières non conductrices comprises, avec des faces imperméables aux particules le long de ces obstacles hydrauliques. Le domaine est soumis à un gradient de charge gauche/droite et tous les bords sont imperméables sauf le bord gauche et le bord droit. Les dispersivités longitudinale et transversale sont respectivement de 0,04 m et 0,07 m et la diffusion porale est de $0,001 \text{ m}^2/\text{s}$. 50 particules sont lâchées en amont. La norme du champ de vitesse horizontal est représentée Fig. 4.23a, et les trajectoires particulières Fig. 4.23b.

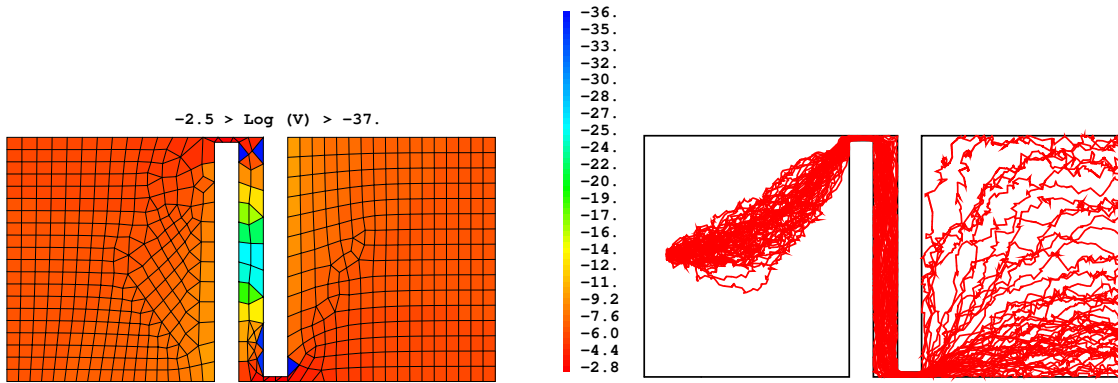


FIG. 4.23: Vitesse horizontale et trajectoires calculées dans une chicane 2D

D'un point de vue qualitatif, nous obtenons de bons résultats. Les particules s'accumulent sur les bords imperméables sans les franchir. Le mouvement moyen des particules longe le ou les bords imperméables. Nous retrouvons bien en sortie les 50 particules de départ. Bien que le domaine soit constitué par un passage très étroit pour l'écoulement ($1/50^e$ de la largeur du domaine), aucune particule ne s'est "perdue". Un grand nombre d'entre elles s'accumulent sur le bord du bas, les autres explorent le reste du domaine aval.

4.3.2 Accumulation de particules sous diffusion non uniforme

Nous examinons ici le cas où la diffusion effective varie dans l'espace. Cette situation intervient dès lors qu'on prend en compte la dispersion et que la vitesse de Darcy

n'est pas uniforme. On la retrouve également en présence de deux milieux différents aux caractéristiques de dispersivité, facteur de forme ou diffusion moléculaire contrastées. Autant dire que c'est une situation assez fréquente. Nous insistons plus particulièrement ici sur le cas où la diffusion effective, appelée improprement "diffusivité" dans ce paragraphe, varie brutalement entre deux domaines géométriques.

Quelle que soit la distribution initiale de particules, l'évolution spontanée du système doit homogénéiser, à l'entraînement convectif près, la répartition particulaire sur le milieu. En particulier, le gradient de concentration dans la direction perpendiculaire à l'interface doit s'annuler. Ceci est indépendant du fait que les niveaux d'énergie des micro-états particuliers soient rehaussés d'un côté par rapport à l'autre. L'énergie mécanique d'un soluté augmente en effet avec la dispersivité du milieu, car, pour une même vitesse moyenne à l'échelle du Volume Élémentaire Représentatif, l'ampleur des contournements imposés par l'hétérogénéité du milieu amplifie la vitesse microscopique. Pour la même raison, l'énergie mécanique d'un soluté augmente avec un accroissement de diffusivité qui serait dû à une tortuosité croissante du milieu. La diffusivité moléculaire est aussi une fonction de la température parce que l'énergie thermique particulaire consiste en une agitation thermique, et donc en une fréquence de saut de longueur microscopique moyenne donnée. Corrélativement, la longueur macroscopique moyenne de saut augmente avec la température. Ces différentes causes de variation du niveau d'énergie des micro-états particuliers ont un impact sur l'entropie réversible du système. Mais elles ne sont pas liées à l'entropie irréversible qui, elle, incarne la qualité de l'occupation de ces micro-états. L'évolution spontanée du système, avec une cinétique que l'on décrit par de la diffusion effective, tend à l'accroissement de l'entropie irréversible, maximale à remplissage équiprobable des micro-états. En d'autres termes, la distribution spatiale particulaire tend à s'uniformiser hors équilibre, pour devenir finalement égale partout.

Si l'on s'en tient à une trajectoire générée par une chaîne de Markov continue (mouvement brownien), c'est-à-dire si le processus aléatoire est non-anticipatif et continu, alors on obtient l'équation de Fokker-Planck suivante, qui est une simplification de l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov (4.21) sous l'hypothèse d'une trajectoire continue et d'un lâcher ponctuel [*Gardiner 1990*] :

$$\partial_t P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t') = -\text{div}_{\vec{z}}[\vec{U}(\vec{z}, t) P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t')] + \Delta_{\vec{z}}[\overline{\overline{D}}(\vec{z}, t) P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t')] \quad (4.14)$$

où $P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t')$ est la probabilité de présence d'une particule au point \vec{z} au temps t sachant qu'elle était au point \vec{y} au temps $t' \leq t$. On reconnaît une vitesse convective \vec{U} et une diffusion D . En toute rigueur, ce sont les accroissements temporels des moments spatiaux d'ordre un et deux respectivement du saut de position lorsque le laps de temps considéré tend vers zéro, en n'évaluant que la partie (ordre 0) de ce moment spatial qui ne dépend pas de la taille de la zone d'intégration (voir éq. (4.19)). Notons que D est à l'intérieur du laplacien. Si l'on considère un ensemble important de particules, on peut assimiler la somme des P à une concentration, les

conditions initiales étant données pour chaque trajectoire élémentaire, et on obtient une nouvelle équation homogénéisée

$$\partial_t C = -\operatorname{div} [\vec{U} C] + \Delta[\overline{\overline{D}} C] \quad (4.15)$$

avec pour flux diffusif :

$$\vec{j}_{diff} = -\vec{\nabla} \overline{\overline{D}} C \quad (4.16)$$

Il s'interprète en notant que la différence de longueur de saut diffusif (proportionnel à \sqrt{D}) conduit à une plus grande propension à quitter une zone fortement diffusive, plutôt qu'à y entrer depuis une zone faiblement diffusive, pendant un laps de temps donné. On voit qu'alors, le flux net diffusif \vec{j}_{diff} étant nul à l'équilibre, la présence d'un $\vec{\nabla} D$ non nul entraîne un $\vec{\nabla} C$ également non nul et opposé. Il y a donc accumulation de particules dans les lieux à faible diffusivité. Ceci contrevient au principe thermodynamique expliqué au début de ce paragraphe.

En réalité, on doit obtenir $\vec{\nabla} C = \vec{0}$ à l'équilibre, et donc un flux diffusif en $\vec{\nabla} C$ seulement et non $\vec{\nabla} DC$. Pour cela, et comme l'expliquent Delay et al. (2005), il convient d'introduire un terme correctif $-C\vec{\nabla} D$ dans le flux diffusif. Ceci peut être obtenu de diverses manières. Semra (1994) introduit, dans le passage d'une maille à l'autre par diffusion, une probabilité de maintien dans la maille d'origine (par rebond sur l'interface), égale à la fraction relative de longueur de saut caractéristique de la maille de départ, par rapport à celle de la maille voisine. Dans l'algorithme présenté dans ce chapitre, le passage dans une nouvelle maille s'effectue toujours depuis l'interface. La correction nécessaire revient à affecter une longueur caractéristique de saut équivalente sur l'interface, égale à la moyenne harmonique des longueurs caractéristiques de saut de chaque côté, soit, en terme de diffusivité :

$$D_{interface}^{\perp} = \frac{\sqrt{D_1^{\perp} D_2^{\perp}}}{\sqrt{D_1^{\perp}} + \sqrt{D_2^{\perp}}} \quad (4.17)$$

Il y a alors une même distance moyenne parcourue par diffusion depuis les interfaces, et donc un flux diffusif net nul en l'absence de gradient de concentration.

Ce développement n'ayant pas été réalisé à ce jour, l'implémentation actuelle génère donc un biais en présence de forts contrastes de vitesse, dispersion ou diffusion.

Les raisons pour lesquelles une chaîne de Markov engendre un processus diffusif incompatible avec l'accroissement spontané de l'entropie irréversible restent flous.

(i) On pourrait remettre en cause une hypothèse fondamentale des chaînes de Markov comme quoi la seule connaissance du présent suffit à déterminer le futur, en introduisant un effet mémoire des positions passées. Cette situation paraît envisageable en soi, mais ne semble pas liée avec l'effet d'une diffusion non uniforme.

(ii) Dans la même veine, on pourrait arguer que le mouvement de la particule va dépendre des propriétés "diffusives" de la zone dans laquelle elle va arriver, en remettant en cause le principe de non-anticipation. En plus de fragiliser l'ensemble

de l'édifice mathématique conduisant à l'équation de Fokker-Plank-Kolmogorov, cet argument oublie que la définition de diffusion, au sens de (4.19), considère le moment spatial de position d'ordre deux *pour des laps de temps tendant vers zéro*. En dehors du cas particulier où une particule est sur l'interface – ce qui n'a pas grand sens physique – la diffusivité intervient par domaine séparés.

(iii) Il ne faut pas non plus attendre *a priori* de l'introduction de sauts instantanés, remettant en cause l'hypothèse de trajectoire continue, la propriété de compenser des hétérogénéités des propriétés diffusives.

(iv) Revenons plutôt à l'équation de Chapman-Kolmogorov :

$$P(\vec{x}_1, t_1 \mid \vec{x}_3, t_3) = \int P(\vec{x}_1, t_1 \mid \vec{x}_2, t_2) P(\vec{x}_2, t_2 \mid \vec{x}_3, t_3) d\vec{x}_2 \quad (4.18)$$

dans laquelle $t_1 \geq t_2 \geq t_3$. Cette expression explicite la possibilité de passer indifféremment par des états intermédiaires virtuels t_2 sans pour autant modifier l'information sur le saut effectif entre t_1 et t_3 . C'est la dépendance à l'unique temps précédent connu. Pour aboutir à la version différentielle de cette équation, il faut faire l'hypothèse suivante (éq. 3.4.2 de Gardiner 1990) : Pour tout $\varepsilon > 0$,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\|\vec{x} - \vec{z}\| < \varepsilon} (\vec{x} - \vec{z}) \otimes (\vec{x} - \vec{z}) P(\vec{x}, t + \Delta t \mid \vec{z}, t) d\vec{z} = \overline{\overline{B}}(\vec{z}, t) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (4.19)$$

qui introduit un tenseur $\overline{\overline{B}}$ s'apparentant à de la diffusion. Le symbole \otimes représente le produit tensoriel. Cette limite doit converger uniformément en \vec{z} , ε et t , afin de pouvoir permuter plus tard limite et dérivée. Admettons que cette dernière contrainte soit satisfaite, et ce même en présence d'une interface discontinue entre deux domaines de "diffusivité" différente. Dans la suite du calcul, on intègre spatialement une fonction test $f(\vec{z})$ modifiée par P , et on dérive le tout par rapport au temps. On obtient alors dans $\partial_t \int_{\vec{z}} f(\vec{z}) P(\vec{x}, t \mid \vec{y}, t')$ le terme :

$$\frac{1}{2} \int_{\vec{z}} \overline{\overline{B}} : \overline{\overline{\Delta}} f(\vec{z}) P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t') d\vec{z} \quad (4.20)$$

où $' :$ ' dénote le produit doublement contracté et $\overline{\overline{\Delta}}$ l'opérateur matriciel des dérivées secondes. C'est la double intégration par partie de cette expression qui donne naissance à la partie diffusive (deuxième ligne) de l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov :

$$\begin{aligned} \partial_t P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t') &= -\text{div} \left[\vec{A}(\vec{z}, t) P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t') \right] \\ &+ \frac{1}{2} \overline{\overline{\Delta}} : \left[\overline{\overline{B}}(\vec{z}, t) P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t') \right] \\ &+ \int_{\vec{x}} [W(\vec{z} \mid \vec{x}, t) P(\vec{x}, t \mid \vec{y}, t') - W(\vec{x} \mid \vec{z}, t) P(\vec{z}, t \mid \vec{y}, t')] d\vec{x} \end{aligned} \quad (4.21)$$

qui est résumée par (4.15) si $W = 0$ (absence de sauts instantanés). L'opérateur $\overline{\overline{\Delta}} :$ exprime la somme de toutes les dérivées secondes croisées.

En présence d'une discontinuité de "diffusivité" δB en une interface, l'intégration par partie de (4.20) introduit un terme en $-P\delta B$ (fois f') du fait de l'apparition d'un Dirac lors de la dérivation de \bar{B} dans la direction normale à l'interface. Bien que cela doivent faire l'objet d'une démonstration mathématique rigoureuse, on voit la proximité forte entre l'expression $-P\delta B$ et un pendant homogénéisé $-C\vec{\nabla}D$, qui viendrait corriger $\vec{\nabla}DC$ pour le ramener à l'expression attendue $-D\vec{\nabla}C$. Cette toute dernière étape doit être confirmée par une approche mathématique rigoureuse.

4.3.3 Cas d'un pompage sous gradient naturel

Considérons un puits de pompage baignant dans un gradient naturel. Le domaine est carré de côté $800m$ maillé à peu près régulièrement avec environ 3600 éléments (quadrangles majoritairement sauf autour du puits). La taille du puits est de $2m \times 2m$ et son débit total de $200 m^2/s$. Le gradient naturel est uniforme de gauche à droite et se superpose au gradient de charge dû au rabattement. La dispersivité est isotrope égale à $1m$. La diffusion porale est fixée à $0,1 m^2/s$. 100 particules sont lâchées en amont du puits, légèrement hors de l'axe, dans la zone de capture purement convective du puits.

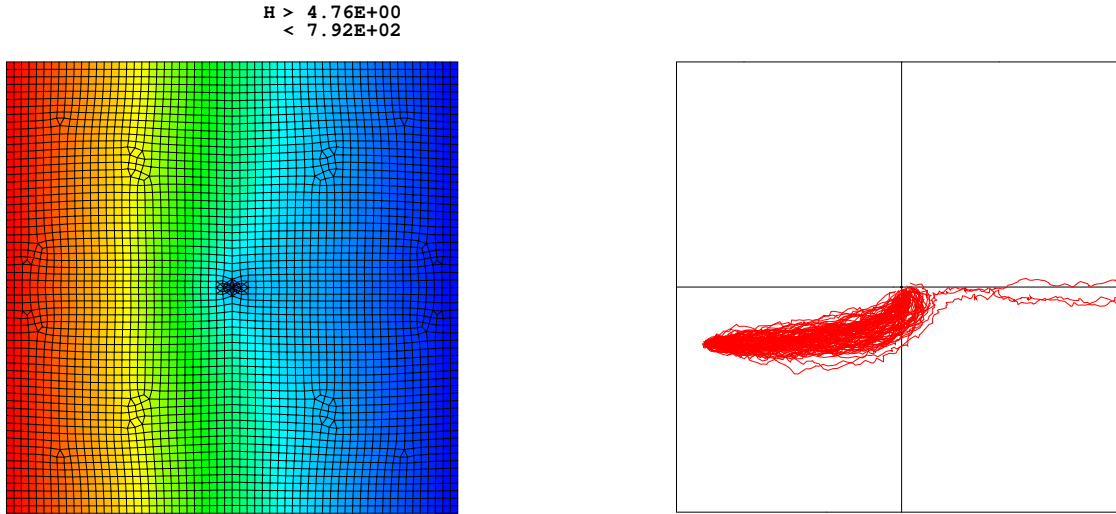


FIG. 4.24: Champ de charge et trajectoires calculées pour un pompage sous gradient naturel

D'un point de vue qualitatif, le nuage de particules s'étale en étant entraîné par l'écoulement et est capté par le puits en convergeant vers celui-ci. Néanmoins, 3 % des particules s'échappent et sont entraînées vers l'aval. Le nombre de particules échappant au puits augmenterait naturellement avec des dispersions croissantes. Ce résultat illustre comment dans certains cas, les phénomènes de dispersion-diffusion ne peuvent pas être négligés. La réponse d'un système peut alors être très différente

de celle modélisée par des lignes de courant uniquement.

4.3.4 Influence des noeuds du maillage

Pour finir, nous avons effectué des cas tests faisant intervenir de façon pathologique le cas particulier de particules passant par des noeuds et longeant des arêtes du maillage dans des cas 2D convectifs purs, et 3D avec convection-dispersion-diffusion. La convection a été prise uniforme et parallèle à un réseau de faces. Les résultats, que nous mentionnons seulement ici, se sont révélés très satisfaisants.

Conclusion

L'algorithme que nous avons présenté, et qui est à ce jour implémenté dans Cast3M, permet de modéliser le transport particulaire en milieu poreux pour ce qui est de la convection, la diffusion moléculaire et la dispersion. Chacune de ses composantes a été validée sur des cas analytiques. Il est de très bonne tenue et permet de faire face à des situations variées. Il est cependant sujet à un biais dans les cas à fort contraste de dispersion ou diffusion. Cette réserve n'est pas intrinsèque à l'algorithme utilisé, mais est dû à un état d'implémentation intermédiaire qui ne prend pas en compte un élément correctif dont je donne la forme. Le recalibrage du pas de temps interne permet de retomber toujours exactement sur une face, et de faire tous les déplacements dans des conditions localement homogènes. On s'affranchit ainsi d'un petit biais sur la distance effective de saut diffusif, auquel sont soumis les méthodes dans lesquelles le saut diffusif s'effectue à cheval entre les mailles traversées.

Il reste toutefois à la charge de l'utilisateur avisé de vérifier les critères numériques, notamment la discrétisation de la diffusion-convection, qui doit être suffisante pour générer des sauts particuliers suffisamment petits et nombreux pour représenter un processus véritablement aléatoire (théorème central limite). Face à cette contrainte, on peut jouer sur le maillage en le raffinant, ou augmenter la discrétisation de sous-maille. Le nombre de particules à lâcher pour représenter correctement un panache de polluant peut devenir une contrainte car plusieurs centaines à plusieurs milliers sont nécessaires pour déployer statistiquement la diffusion de façon satisfaisante.

L'algorithme que nous avons proposé est transposable à n'importe quelle type de discrétisation spatiale, pourvu que l'on dispose d'une interpolation de la vitesse au sein des mailles, et est sujette aux critères de raffinement habituels du problème hydraulique. Son usage ne présume évidemment pas de la pertinence d'une dispersivité définie spatialement. Charge à l'utilisateur de s'en servir à bon escient.

Chapitre 5

Modélisation numérique de précipitation/dissolution d'un composé chimique

Introduction

L'équation de transport d'espèce dissoute en milieu poreux, avec ses seuls deux termes de convection et de diffusion, est considérée comme satisfaisante dans nombre de modèles conceptuels ou d'études. Bien que sa validité physique soit souvent discutée, elle est communément acceptée et son emploi est généralisé. Cependant, lorsque des réactions, ou même simplement des équilibres chimiques sont envisagés, l'écriture numérique du problème devient rapidement plus complexe. Ainsi, lorsque l'élément chimique transporté ne se trouve pas à l'état de trace, mais que sa quantité dissoute devient significative, il peut, sous certaines conditions chimiques, se trouver en excès en solution, et s'immobiliser en phase solide.

Le contexte du stockage de déchets nucléaires, dans lequel cette étude a été réalisée et qui est rappelé en introduction de ce document, est un bon exemple de situation où une géochimie, même sommaire, doit être prise en compte. Si la plupart des radioéléments reste en quantité très faible dans un conteneur de stockage, l'oxyde d'uranium, qui constitue dans le cas du stockage dit "direct" la matrice des pastilles de combustible, est sous forme solide en quantité importante. La dissolution de cette matrice solide dépend étroitement de facteurs limitants d'origine chimique comme sa limite de solubilité, ou sa cinétique de dissolution. Plusieurs scénarios envisagent des hétérogénéités de conditions chimiques, notamment en raison d'une possible barrière ouvragée argileuse, ou d'une éventuelle "poche" de dihydrogène engendrée par l'oxydation du conteneur. Comme la quantité d'un élément susceptible de passer, ou de rester en solution, dépend éminemment des conditions Redox, il peut y avoir des cas de figure où la quantité maximale admissible d'un élément en solution décroisse avec la distance au stockage, ce qui peut engendrer une reprécipitation d'espèce dissoute, et donc un "retard chimique" favorable en terme de sûreté. Inver-

sement, les variations des conditions chimiques à distance d'un stockage pourraient y engendrer des concentrations plus élevées qu'en sa proximité, comme le montrent Yeh et Tripathi (1991) à travers un exemple avec sorption variable, et donc se révéler pénalisantes du même point de vue. On comprend ainsi la nécessité en terme de compréhension des processus, mais aussi en termes opérationnels de dimensionnement d'un stockage de déchets nucléaires, de prendre en compte ces processus.

L'équilibre liquide/solide, sous sa forme la plus simple consistant en une limite de solubilité au-delà de laquelle l'excédent précipite, et en-deçà de laquelle une phase précipitée se dissout, est apparemment simple à modéliser. Bien que le couplage transport-chimie soit développé depuis vingt ans à la Direction de l'Énergie Nucléaire du CEA ainsi que dans la communauté scientifique internationale [*Cederberg et al. 1985* ; *Coudrain-Ribstein 1997* ; *Zysset et al. 1994* , parmi d'autres], il n'est pas nécessaire, dans le cas présent, de faire appel à toute sa généralité. Parmi les difficultés auxquelles devaient faire face, à l'époque de ce travail, les modèles généraux de transport-chimie figurent : (i) des difficultés de convergence ; (ii) une validation expérimentale embryonnaire ; (iii) la détermination des réactions chimiques principales ; (iv) la gestion des minima locaux dans les algorithmes de convergence ; et également (v) des coûts de calcul prohibitifs. Leur généralité-même, qui est un atout considérable, rend toutefois difficile la compréhension des processus contributifs internes dominants. C'est pourquoi je propose ici d'étudier une application simple de la géochimie afin de comprendre physiquement comment elle se couple au transport, et de tester des algorithmes adaptés à cette hypothèse.

En pratique, l'écriture correcte d'un modèle numérique couplé chimie-transport est complexe, et plusieurs méthodes aux avantages complémentaires sont envisageables. Faisant suite à Kirkner et Reeves (1988), Yeh et Tripathi (1989) privilégient dans leur revue les modèles couplant de façon itérative et séquentielle les processus de transport et de chimie par un algorithme de Picard. Ce type de couplage numérique est, d'après eux, le seul à-même d'être utilisé dans des applications réalistes. Pour eux, et suivant la classification de van der Lee (1997) qui soutient cette position dans sa thèse, on peut délaissier la résolution simultanée dite "directe" ou "globale" qui intègre explicitement les réactions chimiques non linéaires dans les équations de transport en s'appuyant sur un algorithme de Newton-Raphson ; ainsi que sa version simplifiée de substitution directe des inconnues géochimiques dans les équations de transport. Nous optons donc ici pour une méthode itérative, qui a en outre l'avantage d'offrir une écriture claire et directe, en lien simple avec la physique. Ceci est un élément important pour l'entretien du code ainsi que pour l'adjonction éventuelle d'autres processus. Notons qu'il reste efficace, sous l'hypothèse de linéarité, de substituer à la fraction adsorbée la fraction dissoute *via* un coefficient de retard constant.

Quelques années plus tard, et postérieurement à mes travaux, van der Lee et de Windt (2001) ainsi que Carrayrou (2002) reviennent sur cette position en soulignant combien plusieurs auteurs privilégient l'approche globale dans un certain nombre de

cas opérationnels [Steeffel et Lasaga 1994 ; van Cappellen et Wang 1996 ; Shen 1997]. Elle serait plus précise quoique que plus coûteuse, et plus stable notamment quand les vitesses de réaction sont grandes [Saaltink 2001]. La complication mathématique et le coût mémoire peuvent toutefois devenir rapidement prohibitifs, même pour des problèmes de complexité modérée [Steeffel et MacQuarrie 1996].

Aux méthodes séquentielles standards : itératives, et non itératives, Carayrou et al. (2002, 2004) ajoutent un schéma non itératif Strang-Splitting à deux demi-pas de temps de transport ; un schéma itératif symétrique où les équations de transport et de chimie ne sont pas chaînées, et qui n'est valable qu'en dehors de l'hypothèse d'équilibre chimique instantané ; et enfin un schéma itératif extrapolant les variations temporelles de matière sur un demi-pas de temps. Ils montrent qu'avec une chimie à cinétique non instantanée, réversible ou irréversible, le schéma itératif symétrique est le plus avantageux du point de vue de l'erreur de couplage (qui est nulle), et du nombre d'itérations requis pour converger. Le schéma Strang-Splitting produit une erreur de couplage en $\mathcal{O}(\Delta t_{adim.}^2)$ et est le deuxième en terme de rapidité de convergence. Les autres schémas donnent une erreur en $\mathcal{O}(\Delta t_{adim.})$ et convergent plus lentement. Le schéma séquentiel itératif arrive bon dernier dans ce contexte, où, soulignons-le, la chimie est hors équilibre.

Un autre choix important réside dans la sélection des inconnues primaires. Kirkner et Reeves (*op. cit.*) distinguent au moins trois formulations différentes : (i) l'approche à concentration mobile (ACM), dans laquelle la variable principale est la concentration en phase aqueuse ; (ii) l'approche à concentration totale explicite (ACTE), qui a pour variable principale la somme des concentrations mobile et immobile ; et l'approche à concentration totale implicite (ACTI), qui en est une variante implémentant le transport. D'autres possibilités s'offrent en présence de plusieurs espèces. Aucune de ces méthodes n'élimine le risque d'apparition de concentration négative, mais la formulation ACM y est plus soumise, et les deux dernières convergent globalement mieux [Yeh et Tripathi 1989]. La méthode ACM est cependant plus intuitive que la dernière, qui transporte la fraction immobile. ACTI et ACTE sont bien adaptées à la prise en compte de sorption. ACTI est la plus stable des deux, mais sa lourdeur la réserve aux cas de sorption sévère. Elle est cependant mal adaptée aux Éléments Finis Mixtes Hybrides [Ph. Montarnal, communication personnelle]. ACTE doit être préférée lorsque le couplage avec la géochimie est plus doux. Ces deux dernières formulations deviennent cependant imprécises en raison d'erreurs de troncature sur l'évaluation *a posteriori* de la concentration en phase aqueuse qui s'obtient en soustrayant la concentration immobile à la concentration totale. Ceci étant dit, les difficultés de convergence sont moins sévères avec un seul constituant chimique, ce qui est le cas du présent exposé. J'ai donc donné la préférence à la formulation à concentration mobile, plus immédiate, en couplant la concentration en phase liquide avec la quantité de précipité disponible, et en cherchant à connaître le terme d'échange entre les deux phases.

L'accent sera mis sur la conservation rigoureuse de la masse, ainsi que sur la précision et la stabilité des schémas numériques. J'indique également, à l'instar de Yeh et Tripathi (1989) comment intégrer la modélisation de décroissance

radioactive. Ce dernier terme est particulièrement intéressant, même lorsque l'on n'a pas affaire à des radioéléments, car il permet de décrire simplement n'importe quel processus de dégradation ou, par extension, de génération.

Dans un premier temps sera exposée la physique simplifiée du transport d'un radio-élément en écoulement géologique en prenant en compte une phase précipitée. Les phénomènes physiques seront passés en revue. Puis, leur implémentation numérique sera détaillée, pour chacun d'entre eux avec, en particulier, les différents algorithmes de dissolution / précipitation. Je propose notamment, pour fixer la concentration à sa limite de solubilité en présence de précipité, un nouvel algorithme par pénalisation. Cette partie se clôturera sur l'efficacité concrète de la mise en oeuvre du modèle couplé et les limitations du modèle.

Notation

Symbole	Nom	Unité
$\bar{\alpha}$	tenseur de dispersion	m
α_L	dispersion longitudinale	m
α_T	dispersion transverse	m
β	coefficient d'implication pour la décroissance	s.d.
δ	symbole de Kronecker	s.d.
ε	porosité (cinématique, totale, etc. toutes supposées égales)	s.d.
κ	coefficient de dissolution	s^{-1}
τ	durée de demi-vie	s
λ	coefficient de décroissance	s^{-1}
ρ	quantité totale de radioélément	mol/dm^3 de milieu
ρ_s	masse volumique de la matrice solide	kg/m^3
θ	coefficient d'implication pour la diffusion	s.d.
τ	période de décroissance	s
d_0	diffusivité moléculaire (en phase liquide infinie)	m^2/s
h	charge hydraulique	m
l	longueur caractéristique	m
q	terme source volumique	$mol/s/dm^3$ de milieu
r	taux de dissolution imposé	$mol/l/s$
t	temps	s
C	concentration	mol/l
C_{Sat}	limite de solubilité	mol/l
D	coefficient de diffusion-dispersion	m^2/s
F	adsorbât	kg/kg de solide support

Symbole	Nom	Unité
F_f	facteur de forme	s.d.
K	conductivité hydraulique (saturé)	m/s
K_d	coefficient de distribution	s.d.
\bar{I}	matrice identité	s.d.
L	quantité libérée par dissolution de précipité	$mol/s/dm^3$ de milieu
M	masse molaire	g/mol
P	précipité	mol/dm^3 de milieu
R	coefficient de retard	s.d.
\vec{U}	vitesse de Darcy	m/s
$()^*$	relatif au père	

5.1 Physique du transport d'un radioélément avec géochimie simple

Les hypothèses que l'on va faire simplifient drastiquement la physique des processus prenant place sur un site de stockage de déchets radioactifs, qui sont cités rapidement dans l'introduction générale. On peut faire entrer en ligne de compte d'autres phénomènes physiques, et imaginer de nombreux couplages entre eux. Il n'est pas dans l'objet de ce chapitre d'expliciter les choix conduisant à la prise en compte ou non de tel ou tel phénomène. La dissolution/précipitation de certaines espèces chimiques peut, sous certaines conditions, s'avérer un élément moteur ou limitant de premier ordre dans le transport des polluants. Pour des raisons méthodologiques, cette étude va donc s'intéresser à ce seul phénomène couplé aux classiques convection et diffusion, ainsi qu'à un terme de décroissance incontournable lorsque l'on traite de radioéléments. Lors de l'étude originelle, la filiation et la dissolution congruente (libération d'espèces annexes lors de la dissolution de la matrice porteuse) avaient également été modélisées. Mais il n'apparaît pas opportun d'alourdir ici l'exposé par la prise en compte de termes qui, s'ils sont essentiels dans le cadre d'une étude complète de chaînes de décroissance, sont peu pertinents pour la compréhension de la méthode que nous proposons. Le lecteur intéressé par l'analyse complète pourra se reporter avec profit à [Maugis 1995].

Dans ce même soucis méthodologique, on ne reviendra pas sur la pertinence de l'emploi de certains concepts pourtant controversés. La dispersivité, par exemple (voir chapitre 3), ne rend pas compte correctement de la dispersion de traceurs dans nombre de cas (temps courts, dépendance avec la forme de l'écoulement, etc.); de même pour la diffusion qui, même modifiée avec un facteur de forme, peine à rendre compte du caractère anomal (le laplacien devient une dérivée d'ordre non entier inférieur à deux) des courbes de restitution observées expérimentalement [Chin et Wang 1992 ; Moroni et Cushman 2001 ; Berkowitz et al. 2002]. On peut encore citer le concept de coefficient de retard, non défini en tête des isothermes de Freundlich, et

inconsistant avec un hystérésis d'adsorption ; etc. L'équation simplifiée de convection / diffusion (voir plus loin éq. (5.10)a) reste commode, malgré ses défauts, et nous servira de point d'appui pour cet exposé.

5.1.1 Rappels et définitions

Dans ce contexte, le nombre de paramètres nécessaires à la modélisation du transport d'un élément chimique est relativement restreint. Nous les présentons ici. Nous supposons qu'un élément chimique se présente sous trois état : dissout (C), adsorbé (F) et précipité (P).

5.1.1.1 Limite de solubilité C_{Sat}

C'est la constante de l'équilibre :



le précipité ayant une activité chimique de 1 s'il est pur (ou de loin majoritaire) dans sa phase.

Cet équilibre peut être considéré instantané, ou se faire avec une certaine cinétique :
 – dissolution constante à un certain taux imposé r (nombre de moles dissoutes par unité de temps),
 – dissolution proportionnelle à $(C_{Sat} - C)$ avec pour coefficient de dissolution κ .

On se limitera à ces trois possibilités.

On n'abordera pas, de plus, la question des éléments chimiques ayant plusieurs isotopes, comme l'uranium, déclinable en ^{238}U , ^{235}U , ^{234}U , ... pour ne citer que les majoritaires dans un stockage direct. C'est la somme des concentrations de tous ces isotopes qui doit être comparée à la limite de solubilité. ^{238}U dominant les autres isotopes et étant en grande quantité solide, maintient pour l'essentiel la concentration d'uranium à la limite de solubilité. Il impose, en réalité, la précipitation immédiate de ^{235}U qui pourrait se trouver en solution, ainsi que tout autre isotope uranique, plus ou moins nocifs. En pratique, on voit bien que découpler les isotopes entre eux entraîne une mésestimation de leurs mobilités effectives. C'est toutefois cette hypothèse, qui constitue le point faible de cette présentation, que l'on va faire, quitte, ensuite, à complexifier les algorithmes pour prendre en compte simultanément tous les isotopes d'un même radioélément. Ainsi, à l'occasion de l'exercice numérique COUPLEX, cette extension du modèle a été implémentée par G. Bernard-Michel en 2004 [Bernard-Michel et al. 2004].

5.1.1.2 Coefficient de distribution K_d / Coefficient de retard R

Le coefficient de distribution K_d est la constante de l'équilibre :



Par définition, $K_d = \frac{\text{activité de l'adsorbât}}{\text{activité du soluté}}$. Le soluté C étant exprimé en mol/l et l'adsorbât F en fraction massique du solide d'accueil, on obtient le nombre de moles d'adsorbât par unité de volume de milieu :

$$F = (1 - \varepsilon) \frac{\rho_s}{M} K_d C \quad (5.3)$$

où M est la masse molaire de l'élément (ici exprimée en kg/mol), ρ_s la masse volumique du solide constituant la matrice, et ε la porosité totale. Ceci donne un coefficient de retard :

$$R = 1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{\rho_s}{M} K_d \quad (5.4)$$

tel que la quantité totale soluté + adsorbât = εRC . Lorsque K_d ne dépend pas de C , la définition (5.4) est équivalente à celle-ci, plus générale :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial (C + F)}{\partial t} \quad (5.5)$$

qui est valable en particulier lorsque l'adsorption est non linéaire.

La désignation de R comme "coefficient de retard" s'explique par le fait qu'un soluté met R fois plus de temps pour être transporté par convection. Par exemple, si un soluté obéit à l'équation

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}(\vec{U}C) = 0$$

dans un champ de vitesse conservatif, alors, on a également

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\vec{U}}{R} \cdot \vec{\nabla} C = 0$$

Cela se comprend physiquement par le fait qu'à toute variation δC de C , correspond une variation δF de F , donc une mobilisation de matière totale égale à $R\delta C$: Une variation de concentration donnée suppose qu'a été transportée une quantité plus grande de soluté, ce qui prend R fois plus de temps.

5.1.1.3 Décroissance radioactive

Elle est caractérisée par une constante de décroissance λ (s^{-1}), égale au logarithme de 2 divisé par la durée de demi-vie, et s'applique de la même manière à l'élément considéré sous toutes ses formes (soluté, adsorbât, précipité). Cela peut sembler contraignant lorsque l'on a affaire à autre chose qu'un produit chimique inerte, mais par exemple à des microbes dont la cinétique de dégradation dépend étroitement du contexte chimique, ou tout simplement lorsque l'on modélise un produit réactif de cette manière simplifiée.

5.2 Modélisation du transport

5.2.1 Équations prises en compte

5.2.1.1 Équations de transport

Ce qui suit s'appuie largement sur [De Marsily 1986]. Considérons un radioélément donné. Nous allons écrire la conservation de nombre de moles pour le soluté + adsorbât :

$$\varepsilon R \frac{\partial C}{\partial t} + \text{div } \vec{j}_C = q_{C+F} \quad (5.6)$$

et pour le précipité :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = q_P \quad (5.7)$$

- Le flux \vec{j}_C comporte :
 - un terme de diffusion / dispersion : $-\overline{\overline{D}}\vec{\nabla}C$ avec $\overline{\overline{D}} = \varepsilon d_0 F_f \overline{\overline{I}} + \overline{\overline{\alpha}} \parallel \vec{U} \parallel$, où ε est la porosité accessible au radioélément, d_0 la diffusivité en phase liquide infinie, $\overline{\overline{I}}$ la matrice identité, $\overline{\overline{\alpha}}$ le tenseur de dispersivité, \vec{U} la vitesse de Darcy de l'eau :
 \triangleright dans le repère de ses directions principales \vec{U} , \vec{U}^\perp),

$$\overline{\overline{\alpha}} = \begin{bmatrix} \alpha_L & 0 \\ 0 & \alpha_T \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

\triangleright dans le repère cartésien, les composantes (i,j) s'écrivent

$$\alpha_{ij} = \delta_{ij}\alpha_T + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_i U_j}{U^2} \quad (5.9)$$

- un terme de convection : $C\vec{U}$.
- Le terme source volumique q_{C+F} contient :
 - un terme de décroissance radioactive : $-\lambda\varepsilon RC$,
 - un terme d'échange avec le précipité (positif si dissolution) : L .
- Le terme source volumique attaché au précipité q_P contient
 - un terme de décroissance radioactive : $-\lambda P$,
 - un terme d'échange avec le soluté (positif si précipitation) : $-L$.

Les équations de transport prennent ainsi la forme suivante :

$$\begin{aligned} \varepsilon R \frac{\partial C}{\partial t} &= \text{div} \left(\overline{\overline{D}}\vec{\nabla}C - C\vec{U} \right) - \lambda\varepsilon RC + L \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\lambda P - L \end{aligned}$$

(5.10)

5.2.1.2 Modèles physiques de précipitation

La limite de solubilité exprime un échange entre un précipité et un élément en solution. La prise en compte d'une limite de solubilité se ramène toujours au calcul d'une quantité L de précipité dissoute par unité de temps. Les inconnues C et P sont couplées si L dépend à la fois de C et de P .

Nous envisageons trois cinétiques différentes pour la limite de solubilité. Le traitement numérique de cet effet non linéaire est expliqué section suivante.

Cinétique instantanée

S'il y a du précipité, on impose à chaque instant, $C = C_{Sat}$. En l'absence de précipité, C doit rester inférieur à C_{Sat} . La quantité de précipité dissoute par unité de temps L doit faire en sorte que ces impératifs soient respectés, et en même temps veiller à ne pas dissoudre plus de précipité qu'il n'en reste. On peut résumer les équations et inéquations impliquées par une dissolution instantanée de la façon suivante :

$$\begin{cases} L = -\varepsilon R \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{\text{Diss.}} = \frac{\partial P}{\partial t} \Big|_{\text{Diss.}} \\ C = C_{Sat} \text{ si } P \geq 0 \\ C < C_{Sat} \text{ si } P = 0 \end{cases} \quad (5.11)$$

Dissolution progressive à cinétique linéaire

Dans ce cas de figure, un écart de C à C_{Sat} n'est pas comblé instantanément. La dissolution et la précipitation se font proportionnellement à cet écart :

$$\begin{cases} L = \kappa(C_{Sat} - C) \\ P \geq 0 \end{cases} \quad (5.12)$$

Les variables C et P sont couplées, mais l'équation reste linéaire.

Dissolution constante

C'est le cas où l'on considère que la limite de solubilité n'est jamais atteinte. La dissolution n'est plus alors limitée que par son taux maximal r , tant qu'il y a du précipité évidemment :

$$\begin{cases} L = r = \text{cste} \\ P \geq 0 \end{cases} \quad (5.13)$$

Les variables C et P ne sont plus couplées, et l'équation est linéaire.

5.2.2 Transcription numérique

Le calcul de migration requiert la connaissance de la vitesse des écoulements hydrauliques afin de pouvoir prendre en compte un terme de convection. Ainsi, la préparation des données du calcul de migration comporte un calcul de la vitesse

de Darcy - ou plutôt des débits hydrauliques - en régime permanent, à partir des conductivités hydrauliques et des charges imposées aux bornes du domaine. On utilise pour ce faire une méthode d'Éléments Finis Mixtes Hybrides [Roberts 1991 ; Dabbene 1993 ; Dabbene 1995].

L'inconnue du calcul de migration est la concentration C , avec un terme source non linéaire L de dissolution, dépendant aussi de la quantité de précipité P par sa disponibilité discontinue. Ce choix ne va pas de soi. Ainsi, une autre méthode que nous n'aborderons pas ici consiste à adopter comme inconnue la quantité totale de l'élément chimique (quantité mobile et immobile), ce qui peut se révéler plus précis lorsqu'il y a beaucoup de précipité par rapport au soluté.

5.2.2.1 Préambule sur la notion d'implicitation

On va parler dans la suite de décroissance implicite, de traitement *implicite* de la diffusion, ... par opposition à une formule *explicite*. Voici une présentation succincte de ce vocabulaire :

Considérons un problème discrétisé en temps, dont la variable soit par exemple C . C_t désigne la valeur, connue, de la variable à l'instant t . $C_{t+\Delta t}$ est la valeur, inconnue, de la variable à la fin du pas de temps Δt . C'est celle que l'on cherche à déterminer. Supposons que l'un des phénomènes pris en compte dans l'équation à résoudre dépende de C , par exemple une décroissance radioactive $-\lambda C$. Si l'on interprète λ comme un opérateur Éléments Finis (gradient, laplacien, etc.), et C comme un vecteur de valeurs, l'exposé suivant restera valable et est ainsi représentatif de tout terme que l'on chercherait à implicitiser. L'équation physique simplifiée est :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C \quad (5.14)$$

Le terme de gauche s'écrit, par une discrétisation temporelle de type Différences Finies Décentré : $\frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t}$. La question de l'implicitation revient à choisir une valeur spécifique de C dans le terme de droite. :

- si on choisit de prendre C_t , le traitement du phénomène est dit *explicite* car la grandeur $-\lambda C_t$ est directement disponible et évaluable :

$$\frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = -\lambda C_t \quad (5.15)$$

donne rapidement $C_{t+\Delta t}$.

- si on choisit de prendre $C_{t+\Delta t}$, le traitement du phénomène est dit *implicite*. En effet, on ne connaît pas encore $C_{t+\Delta t}$. Le calcul ne se fera donc pas en évaluant $-\lambda C_{t+\Delta t}$, mais de façon indirecte en l'intégrant dans le premier membre de l'équation :

$$\frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = -\lambda C_{t+\Delta t} \quad (5.16)$$

s'écrit

$$(1 + \lambda\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = -\lambda C_t \quad (5.17)$$

qui est l'écriture numérique de la décroissance lorsque celle-ci est traitée de façon implicite.

– on peut également choisir une valeur pour C intermédiaire entre C_t et $C_{t+\Delta t}$, en utilisant un certain coefficient d'implicitation, noté β dans cet exemple. La valeur choisie pour C est alors :

$$C_\beta = (1 - \beta)C_t + \beta C_{t+\Delta t} \quad (5.18)$$

L'équation (5.14) s'écrit numériquement d'une façon plus générale

$$(1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = -\lambda C_t \quad (5.19)$$

Nomenclature

- $\beta = 0$: schéma d'Euler explicite
- $\beta = 1/2$: schéma de Crank-Nicholson
- $\beta = 2/3$: schéma de Galerkin
- $\beta = 1$: schéma d'Euler implicite

5.2.2.2 Description du cas test

Avant de passer en revue la façon dont ont été traités les différents phénomènes physiques, voyons le support ayant servi à la mise au point et à une validation sommaire du modèle. En effet, différents aspects numériques seront illustrés à la lumière de ce cas test.

On se place dans un cas 2D assez simple : un domaine rectangulaire irrigué par un champ de vitesse uniforme et permanent, comportant une source placée en amont sur l'axe de symétrie. Les données qui suivent constituent un cas générique. Elles sont valables sauf mention contraire par la suite.

Maillage du cas test

C'est un maillage carré très simple de 240 éléments (Cf. Figure 5.1).

Les arêtes font 0,5 m,

Longueur totale = 12m,

Largeur = 5 m.

Une ligne frontière sur trouve en aval à l'ordonnée 8m.

La source (2 éléments) est situé à 4m du bord amont, sur l'axe de symétrie ; ses dimensions sont 1m x 0,5m.

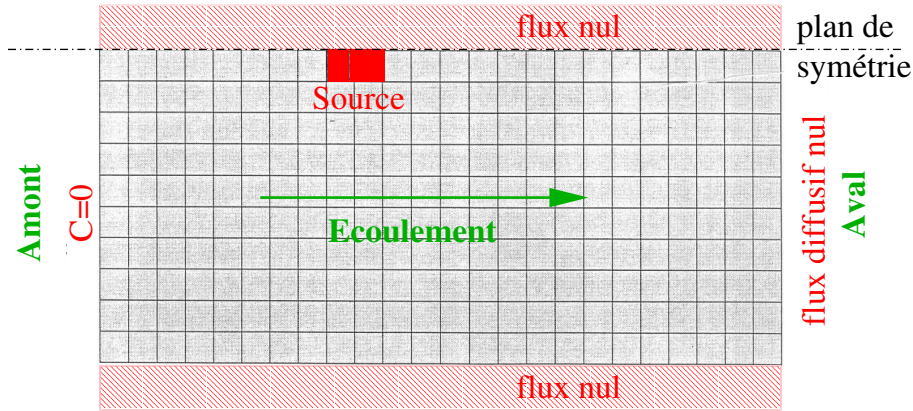


FIG. 5.1: Maillage utilisé comme cas test (240 éléments). On a porté les conditions aux limites hydraulique (vert) et pour le transport (rouge) ainsi que la vitesse de Darcy uniforme.

Données physiques adoptées pour les tests

Vitesse de Darcy = $2 \cdot 10^{-8} m/s$ uniforme sur le domaine (Cf. Figure 5.1).

Porosité = 1

Coefficient de retard = 1

Dispersivité = 1 m

Diffusivité moléculaire = $10^{-8} m^2/s$, diffusion implicite.

Conditions aux limites

Elles sont reportées sur la Figure 5.1.

- sur les côtés, flux diffusif imposé nul
- sur l'extrémité aval (à droite), flux diffusif imposé nul
- sur l'extrémité amont, $C = 0$, donc flux convectif imposé nul.

Conditions initiales

- $C = C_{Sat}$ dans la source,
- $C = 0$ ailleurs.

Nous allons maintenant examiner chacun des termes de l'équation de transport, avec, lorsque cela est possible, des critères de précision et de stabilité correspondant.

5.2.2.3 Diffusion - Convection

On regroupe dans "diffusion" l'ensemble des phénomènes diffusifs, à savoir la diffusion pure, la dispersion, voire de la diffusion numérique (voir plus loin : Stabilité – Diffusion numérique). On se reportera avec avantage aux travaux de [Dabbene 1995] sur le problème numérique du traitement de la diffusion avec convection. On en rappelle brièvement les grandes lignes ici.

Dans ce qui suit, les nombres adimensionnels Fourier (également noté Fo), Courant (noté CFL), et Peclet (noté Pe) sont des valeurs numériques de maille. Elles sont calculées à partir des tailles de maille. Leurs valeurs sont donc différentes de celles obtenues avec des longueurs caractéristiques du domaine de calcul. De plus, au lieu de les évaluer en deux dimensions, on se sert des expressions obtenues en 1D car leur calcul est plus simple. En principe, s'il y a une condition à respecter en 2D ou 3D, la condition 1D est suffisante, pourvu qu'on choisisse comme direction d'évaluation celle de la vitesse.

Diffusion

Le flux diffusif $-\overline{\overline{D}}\vec{\nabla}C$ est traité de façon implicite (le coefficient d'implication θ est toujours pris égal à 1) :

$$\text{div } \vec{j}_{Diff} = -\text{div } (\overline{\overline{D}}\vec{\nabla}C_{t+\Delta t}) \quad (5.20)$$

Précision – Nombre de Fourier

Puisque le calcul est implicite, la stabilité du schéma est acquise. Le nombre de Fourier, défini ci-après d'après l'équation (5.10)a, est seulement un critère de précision.

$$Fo = \frac{2D \Delta t}{\ell^2 \varepsilon R} \quad (5.21)$$

où D est une valeur de $\overline{\overline{D}}$ dans une direction choisie : soit \vec{x} cette direction (ici on prend celle de la vitesse), on prend $D = {}^t\vec{x}\overline{\overline{D}}\vec{x}$ (où ${}^t\vec{x}$ désigne la transposée de \vec{x}). Cette notation est indépendante du repère choisi. ℓ est une longueur de maille, logiquement prise dans la même direction que D .

On peut démontrer qu'en 1D, sur un maillage régulier, la précision de calcul est optimale avec un nombre de Fourier égal à 1. L'expérience a montré que, quel que soit l'implication choisie, des oscillations stables de concentration – qui peuvent être importantes – apparaissent quand le nombre de Fourier passe au-dessous d'une certaine valeur. Cette valeur en-deçà de laquelle la matrice du système n'est plus une M -matrice dépend du maillage et des valeurs des autres paramètres physiques. Elle est voisine de 1/3. Deux ans après que Mouche [Communication personnelle] a proposé une telle valeur seuil en 1D, Joly en a fait la démonstration pour les Éléments Finis [Joly, *Personal Communication*], et Hoteit pour les Éléments Finis

Mixtes Hybrides en implicite [Hoteit et al. 2002]. Ce dernier trouve une valeur seuil de $1/3$ quand le maillage est composé de rectangles, et de $\sqrt{2}/3$ quand il est composé de triangles.

Si l'on avait choisi un schéma explicite, le nombre de Fourier aurait été un critère de stabilité avec la condition $Fo < 1$.

Convection

Le flux convectif est calculé de façon implicite lui-aussi ($\theta_c = 1$) :

$$\text{div } \vec{j}_{Conv} = -\text{div} (C_{t+\Delta t} \vec{U}) \quad (5.22)$$

Précision – Nombre de Courant

Le nom complet de ce nombre est Courant-Friedrichs-Lewy, ou CFL [Courant et al 1928]. Du fait son implication totale, le schéma de convection est inconditionnellement stable, et le CFL est un critère de précision uniquement.

$$CFL = \frac{\| \vec{U} \| \Delta t}{\ell \varepsilon R} \quad (5.23)$$

où ℓ est une longueur de maille (par exemple prise dans la direction de la vitesse). La précision du calcul s'amenuise lorsque le CFL s'écarte de 1.

Stabilité – Diffusion numérique

Précision / Validité – Nombre de Peclet

La diffusion et la convection sont deux phénomènes concurrents. On mesure leurs importances relatives en utilisant le nombre de Peclet :

$$Pe = \frac{2 CFL}{Fo} = \frac{\| \vec{U} \| \ell}{D} \quad (5.24)$$

Si notre modèle avait été explicite pour la convection, il aurait fallu que $Pe < 1$ afin d'éviter des oscillations numériques. Ici, on n'a plus de telle condition, le Peclet reflète simplement les importances relatives de la convection par rapport à la diffusion.

Diffusion numérique

Lorsque $Pe > 1$ et que la convection est calculée de façon explicite, il faut redonner une part prédominante à la diffusion. A cette fin, on présente ici deux manières de procéder.

La première est la méthode classique de décentrement. Ce schéma, dit "upwind", consiste à ajouter à la diffusion un terme

$$D_{up} = \|\vec{U}\| \ell \quad (5.25)$$

qui a pour principe pour calculer le terme convectif de prendre la vitesse en amont de la maille considérée. On comprend immédiatement, par (5.24), que le Peclet redevient inférieur ou égal à 1. Ceci corrige donc des instabilités d'origine spatiale, et au passage, temporelles.

La deuxième méthode s'attaque uniquement aux instabilités d'origine temporelle en passant à l'ordre deux en temps par adjonction d'une diffusivité numérique D_ν tirée du schéma Tenseur Visqueux [Varga 1962 ; Magnaud 1990] :

$$D_\nu = \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\varepsilon R} [U_i U_j]_{i,j} \quad (5.26)$$

où U_i et U_j sont les $i^{\text{ième}}$ et $j^{\text{jème}}$ composantes de \vec{U} . Le Peclet calculé avec $D + D_\nu$ redevient inférieur à 1 moyennant une condition supplémentaire sur le pas de temps : $CFL > 2(1 - 1/Pe)$.

La diffusivité numérique permet donc de conduire des calculs à convection explicite dominante en ajoutant à la diffusivité physique un terme qui peut être très important. La physique du problème se trouve donc changée là où la diffusivité numérique intervient, ce qui peut toutefois rester localisé en certains domaines géométriques seulement.

5.2.2.4 Décroissance

Il faut séparer les décroissances du soluté (+ adsorbât), du précipité et d'une éventuelle fraction contenue dans la matrice.

Décroissance du soluté et de l'adsorbât

L'équation physique traitée est :

$$\varepsilon R \frac{\partial C}{\partial t} = -\varepsilon R \lambda C + \mathcal{A}(C) \quad (5.27)$$

où l'opérateur \mathcal{A} symbolise le reste des termes de l'équation (convection, dispersion, diffusion, dissolution, terme source, etc.).

En vertu de ce qui a été expliqué au paragraphe 5.2.2.1, il suffit de compléter l'équation (5.19) pour obtenir le détail de l'écriture de la décroissance au sein de l'équation de bilan :

$$\varepsilon R(1 + \lambda \beta \Delta t) \frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = -\varepsilon R \lambda C_t + \mathcal{A}(C_t, C_{t+\Delta t}) \quad (5.28)$$

Quel coefficient d'implication choisir ?

La prise en compte de la décroissance doit fonctionner au moins dans le cas de la décroissance seule. On voit nettement Figure 5.2 que la meilleure description nécessite $\beta = 0,5$. D'une façon générale, la décroissance explicite fait décroître ce qui est présent à l'instant t , et la décroissance implicite fait décroître tous les termes tendant à modifier C entre t et $t + \Delta t$ (représentés dans l'éq. (5.28) par \mathcal{A}). Il est logique de faire décroître ces derniers aussi puisque leur influence se fait ressentir pendant tout le pas de temps et non pas à la fin seulement. Là encore, $\beta = 0,5$ se justifie.

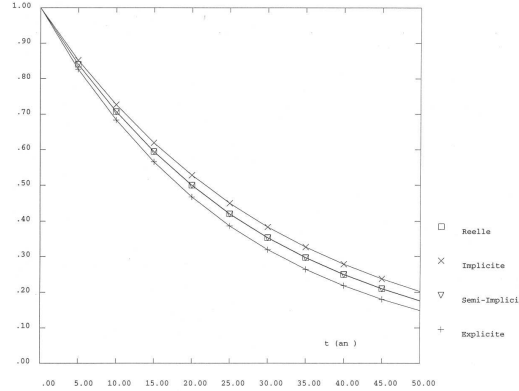


FIG. 5.2: Comparaison du calcul de la décroissance seule avec un schéma explicite, semi-implicite, implicite et analytique

Lorsque la concentration diminue (cas sans terme source), l'implication baisse la quantité décriue. Inversement, un calcul implicite augmente la décroissance si la concentration augmente (cas avec un fort terme source, par exemple). La différence doit cependant rester faible si le pas de temps est suffisamment petit. Pourtant, dans les cas où le pas de temps est imposé par d'autres critères (comme la précision de la diffusion, par exemple) la question de la précision de la numérisation de la décroissance doit absolument être envisagée, et sera abordée plus bas.

Décroissance du précipité

Le calcul du précipité ne fait pas l'objet d'une résolution numérique d'équation mais d'une résolution analytique directe de l'éq. (5.10)b, qui donne une expression comparable à l'équation (5.28) :

$$P_{t+\Delta t} = \frac{1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} P_t + \frac{\mathcal{A}_P(P_t, P_{t+\Delta t})}{1 + \lambda\beta\Delta t} \quad (5.29)$$

où l'opérateur \mathcal{A}_P désigne les contributions de l'ensemble des phénomènes autres que la décroissance agissant sur le précipité (dissolution, etc.). Ici, ce terme se réduit à $\mathcal{A}_P = -L$.

Validité et Stabilité

Écrivons que la décroissance ne doit pas ôter plus que ce qui est présent au début du pas de temps : Dans la formule suivante, dérivée de (5.28)

$$C_{t+\Delta t} - C_t = \frac{-\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} C_t + \frac{\mathcal{A}(C_t, C_{t+\Delta t}) \Delta t}{\varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t)} \quad (5.30)$$

ce critère revient à écrire

$$\frac{\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} C_t \leq C_t \quad (5.31)$$

Cela donne le critère suivant sur Δt et β :

$$\boxed{(1 - \beta)\lambda\Delta t \leq 1} \quad (5.32)$$

Notons que cela revient à dire que la décroissance seule ($\mathcal{A} \equiv 0$) ne peut engendrer de valeurs négatives.

Précision

Afin de se faire une idée de la précision du schéma numérique de décroissance, prenons le cas simple de la décroissance seule, décrit par l'équation (5.14). On peut alors aisément comparer résultat analytique et résultat numérique.

Après n pas de temps constants Δt , la solution analytique est

$$C_{ana}(t_0 + n\Delta t) = C_0 e^{-\lambda n\Delta t} \quad (5.33)$$

tandis que la solution numérique se déduit simplement de (5.30) avec $\mathcal{A} \equiv 0$:

$$C_{num}(t_0 + n\Delta t) = C_0 \left(\frac{1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} \right)^n \quad (5.34)$$

On peut en déduire, pour ce seul cas de décroissance seule, une valeur de β pour laquelle solutions analytique et numérique sont équivalentes :

$$\beta^* = \frac{1}{1 - e^{-\lambda\Delta t}} - \frac{1}{\lambda\Delta t} \quad (5.35)$$

Quand Δt est petit, on retrouve que $\beta^* = 1/2$. La précision de la méthode repose ainsi sur le choix du pas de temps adopté par rapport à la durée de vie de l'élément τ , et aussi sur la valeur du coefficient d'implicitation β . La Figure 5.3 montre les évolutions de C/C_0 au cours du temps, en fonction du pas de temps, et cela pour les trois valeurs de β : 0, 1/2 et 1.

Si $\Delta t \gg \tau$, soit la solution numérique diverge, soit l'imprécision est très grande. Or on peut être amené, dans le cas où le transport est lent, à choisir un pas de temps élevé pour satisfaire aux critères de convergence de la diffusion. Il est alors

indispensable de prendre $\beta = 1$. On voit qu'ensuite (Figure 5.3c), la décroissance est fortement sous-estimée, mais qu'elle n'a en fait qu'un ou deux pas de temps de retard. L'erreur en pourcentage est élevée, mais de l'ordre de $2\Delta t$ seulement dans le temps. Si Δt est élevé, cette erreur peut ne pas être acceptable. Il faut dès lors effectuer des simplifications pour lever l'incompatibilité des temps caractéristiques de transport et de décroissance. Cette méthode est exposée dans [Maugis 1995] sur la base de [Mouche et Mangin 1986].

5.2.2.5 Diverses cinétiques de dissolution – Limite de solubilité

Le comportement d'une espèce chimique change en présence de sa phase solide. Un équilibre tente alors de s'instaurer entre les deux phases dissoute et précipitée. Cet équilibre se traduit en général par une limite de solubilité, atteinte instantanément ou progressivement. Il se peut aussi que l'on reste toujours loin de la limite de solubilité, auquel cas le taux de dissolution peut être supposé constant.

En l'absence de limite de solubilité, l'équation de transport régissant la migration est linéaire avec pour seule variable C . Lorsque l'on veut tenir compte d'une limite de solubilité, soit la quantité de précipité dissoute par unité de temps L est une donnée du problème (cas du taux de dissolution imposée), soit elle est une inconnue du problème. C et L sont alors couplées dans l'éq. (5.10) appelée ici pour mémoire :

$$\varepsilon R \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left(\overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C - C \vec{U} \right) - \lambda \varepsilon R C + L$$

Limite de solubilité à équilibre de dissolution instantanée

Pour découpler les variables C et L , on utilise une méthode par point fixe de type prédicteur correcteur itératif. Deux algorithmes ont été testés selon la donnée physique faisant l'objet d'une prévision. Les démarches physiques sous-jacentes sont différentes mais, comme nous allons le voir, les résultats sont semblables. Le choix entre les deux algorithmes se fera plutôt sur des critères numériques.

Le principe du point fixe est le suivant :

1. Définir une condition initiale pour la variable caractérisant la dissolution,
2. récupérer les valeurs du pas de temps précédent et s'en servir comme point de départ pour le pas de temps suivant ; y compris pour la variable caractérisant la dissolution,
3. faire un calcul de C et P avec l'intégralité des phénomènes physiques, en prenant comme valeur de la dissolution celle définie à l'itération ou au pas de temps précédent,
4. réévaluer la variable caractérisant la dissolution,
5. si le critère de sortie sur cette variable n'est pas respecté, reprendre en 3. Un nombre maximal d'itération est fixé.

Les interactions avec la décroissance doivent être traitées prudemment de façon à être sûr que l'élément sera décréu une fois et une seule.

Il est tout-à-fait possible de faire dépendre C_{Sat} du temps et de l'espace.

Nous présentons maintenant deux algorithmes différents pour modéliser par point fixe une limite de solubilité à cinétique instantanée, puis une comparaison des deux et des préconisations suivant le cas de figure à traiter.

Prédiction de la présence de précipité

Cette méthode est basée sur l'usage d'un indicateur, et d'une méthode de pénalisation. La variable caractérisant la dissolution est un indicateur I valant 0 lorsqu'il y a du précipité et 1 sinon. C est imposée à C_{Sat} par pénalisation. Le paramètre de l'algorithme est le coefficient de pénalisation ϖ .

Principe de la pénalisation

On utilise la pénalisation pour imposer une valeur à la concentration. Le principe est d'ajouter dans l'équation à résoudre un terme source implicite de la forme :

$$\varpi(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}) \quad (5.36)$$

où ϖ est un nombre très grand et C_{Sat} la valeur à imposer.

Écrivons l'équation de transport avec limite de solubilité (5.10)a, après discrétisation temporelle et avec le terme de pénalisation, dans laquelle on a regroupé tous les termes du second membre sous la notation $\mathcal{B}(C, P, \vec{x}, t)$:

$$\frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = \mathcal{B}(C, P, \vec{x}, t) + \varpi(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}) \quad (5.37)$$

Le terme \mathcal{B} est sans rapport avec la dissolution. Cette équation est équivalente à

$$\frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = \frac{\mathcal{B}(C, P, \vec{x}, t)}{1 + \varpi \Delta t} + \frac{\varpi \Delta t}{1 + \varpi \Delta t} \frac{C_{Sat} - C_t}{\Delta t} \quad (5.38)$$

Il est alors nécessaire d'avoir choisi ϖ suffisamment grand pour que, $\varpi \Delta t \gg 1$. Un développement limité donne alors :

$$C_{t+\Delta t} = C_{Sat} - \frac{1}{\varpi} \frac{C_{Sat} - C_t}{\Delta t} + \frac{\mathcal{B}(C, P, \vec{x}, t)}{\varpi} \quad (5.39)$$

Si $\mathcal{B}(C, P, \vec{x}, t)$ est effectivement négligeable devant ϖ , on a bien $C_{t+\Delta t} \approx C_{Sat}$ avec une précision de l'ordre de $1/\varpi$.

Présentation de l'algorithme

Afin de traduire la disponibilité du précipité pour atteindre la saturation, on écrit qu'il se dissout entièrement en début de pas de temps. Le terme de pénalisation

$H(C_{Sat} - C_{t+\Delta t})$, négatif lorsqu'on est à saturation, contient la quantité à ajouter au soluté (après adjonction du précipité) pour arriver à saturation. C'est en fait la quantité de précipité que l'on a dissout en trop ; donc la quantité restante de précipité. Il est bien sûr nul en l'absence de précipité.

1. I_{t_0} = distribution (0 ou 1) du précipité à $t = t_0$.

2. Initialisation d'itération :

$$C_{t+\Delta t}^0 = C_t$$

$$P_{t+\Delta t}^0 = P_t$$

$$I_{t+\Delta t}^0 = I_t$$

Le terme de pénalisation $H_{t+\Delta t}^0 = \varpi I_{t+\Delta t}^0$ vaut ϖ là où il y a du précipité à l'instant t , 0 ailleurs.

3. Pour passer d'une itération $i - 1$ à l'itération i :

Déterminer C et P compte tenu de la distribution de précipité de l'itération précédente :

▷ Résoudre l'équation de migration sur C avec une distribution $I_{t+\Delta t}^{i-1}$:

$$H_{t+\Delta t}^{i-1} = \varpi I_{t+\Delta t}^{i-1} :$$

$$\begin{aligned} \varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} &= \text{div} \left(-\overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C_{t+\Delta t}^i + C_{t+\Delta t}^i \vec{U} \right) \\ -\varepsilon R\lambda C_t + q + [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} &+ H_{t+\Delta t}^{i-1}(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}) \end{aligned} \quad (5.40)$$

les deux derniers termes de cette expression constituent la dissolution L exprimée grâce à l'éq. (5.29) avec $\mathcal{A}_P = -L$. En faisant passer le dernier terme $C_{t+\Delta t}$ dans le membre de gauche, on obtient :

$$\begin{aligned} [\varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) + H_{t+\Delta t}^{i-1}\Delta t] \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} &= \text{div} \left(-\overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C_{t+\Delta t}^i + C_{t+\Delta t}^i \vec{U} \right) \\ -\varepsilon R\lambda C_t + q + [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} &+ H_{t+\Delta t}^{i-1}(C_{Sat} - C_t) \end{aligned} \quad (5.41)$$

▷ Calculer le nouveau précipité

$$P_{t+\Delta t}^i = \frac{H_{t+\Delta t}^{i-1}\Delta t(C_{Sat} - C_{t+\Delta t})}{1 + \lambda\beta\Delta t} \quad (5.42)$$

4. Réévaluer la distribution de précipité :

$$I_{t+\Delta t}^i = \begin{cases} 1 & \text{si } C_{t+\Delta t}^i \geq C_{Sat} \text{ ou } P_{t+\Delta t}^i > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.43)$$

5. Critère de sortie des itérations : $I_{t+\Delta t}^i = I_{t+\Delta t}^{i-1}$.

▷ Si le critère de sortie est vérifié, on adopte $C_{t+\Delta t}^i$, $P_{t+\Delta t}^i$, et $I_{t+\Delta t}^i$ comme valeurs de fin de pas de temps. La quantité algébrique dissoute vaut :

$$L_{t+\Delta t} = [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} + H_{t+\Delta t}^{i-1}(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}) \quad (5.44)$$

$$= \frac{1}{\Delta t} \{ [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t - (1 + \lambda\beta\Delta t) P_{t+\Delta t} \} \quad (5.45)$$

▷ Si le critère de sortie n'est pas vérifié, on reprend à l'étape n°3.

Remarques - Précision du calcul

– La variable $C_{t+\Delta t}$ est proche de C_{Sat} à $1/\varpi$ près, sauf si $\mathcal{B}(C, P, \vec{x}, t)$ n'est pas négligeable devant ϖ . Cela peut arriver en particulier si P_t est très important. Il faut donc toujours s'assurer que le coefficient de pénalisation est très grand devant la quantité volumique de précipité, ce qui peut rendre ϖ vraiment très grand lorsqu'il y a beaucoup de précipité, et se répercuter de manière rédhibitoire sur la précision de calcul.

– Le précipité $P_{t+\Delta t}$ est réévalué à chaque pas de temps en multipliant $(C_{Sat} - C_{t+\Delta t})$ par ϖ . C'est donc l'imprécision de $C_{t+\Delta t}$ à C_{Sat} qui gouverne le calcul du précipité. La qualité de l'estimation de $P_{t+\Delta t}$ dépend alors du choix de ϖ , compte tenu de la précision de la machine. Prenons un exemple avec $\varpi = 10^{10}$:

$C_{t+\Delta t}$ est proche de C_{Sat} à 10^{-10} près. Admettons que la machine soit précise à 10^{-14} près. Il ne reste alors plus que 4 chiffres significatifs dans $C_{Sat} - C_{t+\Delta t}$, donc aussi pour $P_{t+\Delta t}$. Le bilan global n'est alors correct qu'à 10^{-4} près et va dériver au fil des pas de temps. La quantité totale de traceur présent en fin de calcul risque de différer fortement de la quantité injectée à t_0 !

La précision du calcul de $P_{t+\Delta t}$ est de l'ordre de $\varpi \times \langle \text{précision machine} \rangle$. ϖ ne doit donc pas être trop grand. On choisit $\varpi = \sqrt{\langle \text{précision machine} \rangle}$ de façon à ce que C et P soient évalués avec la même précision. Or, d'après la première remarque, lorsqu'il y a beaucoup de précipité (plus de $\varpi \Delta t \text{ mol/dm}^3$) la pénalisation n'assure plus du tout $C_{t+\Delta t} = C_{Sat}$. Il s'ensuit que *la méthode de pénalisation est inadaptée aux cas où il y a une grosse quantité initiale de précipité*, comme pour une matrice se dissolvant lentement.

Remarques - Vitesse de convergence :

Une itération correspond à une variation de la présence de précipité : lorsque le précipité d'une maille s'épuise ou bien que la reprécipitation commence dans une maille. En d'autres termes, chaque phase transitoire dans la présence de précipité coûte une itération. Par exemple, si un front de dissolution ou de reprécipitation progresse de 5 mailles en un pas de temps, il faudra au plus 5 itérations pour atteindre le nouvel état du temps suivant. Les cas à limite de solubilité variable, source de régime transitoire prolongé, requièrent un grand nombre d'itérations car

des fronts de dissolution et de reprécipitation apparaissent ; tandis que les cas avec front de limite de solubilité n'ont que de rares régimes transitoires et nécessitent par conséquent peu d'itérations.

Une itération prend en compte une distribution possible de précipité, et donc une répartition unique du coefficient de pénalisation. Or l'étape la plus coûteuse en temps dans la résolution de l'équation de transport est le calcul puis l'inversion d'une matrice dépendant de la répartition du coefficient de pénalisation. Cette matrice est donc recalculée et inversée à chaque itération.

D'une façon générale, la convergence est atteinte après peu d'itérations (moins d'une dizaine), mais chaque itération demande des calculs lourds.

Cette méthode est adaptée aux variations spatiales brutales de limite de solubilité. Il faut néanmoins trouver un compromis dans le choix du coefficient de pénalisation de façon à ce qu'il soit suffisamment grand pour imposer C à C_{Sat} , mais pas trop pour ne pas grever le bilan de masse. Ce compromis n'est pas toujours possible.

Prédiction de la quantité dissoute

Voici le deuxième algorithme de précipitation/dissolution à cinétique instantanée. Cette fois-ci, la variable caractérisant la dissolution est la quantité dissoute L par unité de temps pendant le pas de temps en cours. Le paramètre de l'algorithme est η , la précision souhaitée de C à C_{Sat} .

1. $L_{t_0} = 0$

2. Initialisation d'itération :

$$C_{t+\Delta t}^0 = C_t$$

Le précipité est entièrement décru (décroissance explicite et implicite) en tête de pas de temps :

$$P_{t+\Delta t}^0 = \frac{1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} P_t \quad (5.46)$$

▷ La quantité éventuellement soluble n'a subi que la décroissance explicite, pas la décroissance implicite. Elle minimise la dissolution L_t reportée depuis le pas de temps précédent :

$$L_{t+\Delta t}^0 = \min \left\{ [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} ; L_t \right\} = \min \left\{ (1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{P_{t+\Delta t}^0}{\Delta t} ; L_t \right\} \quad (5.47)$$

3. Pour passer d'une itération $i - 1$ à l'itération i :

Déterminer C et P compte tenu de la quantité dissoute trouvée à l'itération précédente :

▷ Résoudre l'équation de migration sur C avec un terme de dissolution $L_{t+\Delta t}^{i-1}$:

$$\varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} = \text{div} \left(-\overline{\vec{D}} \vec{\nabla} C_{t+\Delta t}^i + C_{t+\Delta t}^i \vec{U} \right) - \varepsilon R \lambda C_t + q + L_{t+\Delta t}^{i-1} \quad (5.48)$$

▷ Calculer le nouveau précipité

$$P_{t+\Delta t}^i = \frac{1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} P_t + \frac{L_{t+\Delta t}^{i-1} \Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} \quad (5.49)$$

4. Réévaluer la quantité supplémentaire à dissoudre :

$$\Delta L_{t+\Delta t}^i = \frac{1 + \lambda\beta\Delta t}{\Delta t} \min \{ P_{t+\Delta t}^i ; \varepsilon R(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}^i) \} \quad (5.50)$$

Cette grandeur est celle qui, ajoutée à $L_{t+\Delta t}^{i-1}$, donnerait $C_{t+\Delta t}^i = C_{Sat}$ si le transport était inchangé par cette opération.

5. Critère de sortie des itérations : $|\Delta L_{t+\Delta t}^i| < \eta \frac{(1 + \lambda\beta\Delta t)\varepsilon R C_{Sat}}{\Delta t}$, c'est-à-dire
- soit il reste du précipité et $\left| \frac{C_{Sat} - C_{t+\Delta t}^i}{C_{Sat}} \right| < \eta$: C est proche de C_{Sat} à $\eta(\%)$ près,
 - soit il ne reste plus de précipité à la fin du pas de temps à $\eta\varepsilon R C_{Sat}$ près.

Si le critère de sortie est vérifié, on adopte $C_{t+\Delta t}^i$, $P_{t+\Delta t}^i$, et $I_{t+\Delta t}^i$ comme valeurs de fin de pas de temps. Sinon, on reprend à l'étape n° 3 avec $L_{t+\Delta t}^i = L_{t+\Delta t}^{i-1} + \Delta L_{t+\Delta t}^i$.

Remarques - Précision de l'algorithme

– La précision de $C_{t+\Delta t}$ par rapport à C_{Sat} est donnée par le paramètre η et le nombre maximal d'itérations que l'on s'autorise. Une précision de 10^{-2} est accessible assez facilement (une vingtaine d'itérations typiquement). Par contre, pour obtenir une précision de 10^{-3} , il faut souvent dépasser la centaine d'itérations. Cela n'est absolument pas raisonnable pour un maillage fin ou un grand nombre de pas de temps. Si on limite de nombre d'itérations à 100, il est fréquent que la précision requise ne soit pas atteinte. Un compromis raisonnable s'obtient avec $\eta = 5 \cdot 10^{-3}$. *C approche C_{Sat} avec une faible précision.*

Comme on limite le nombre d'itérations à une certaine valeur maximale (par exemple 100), on peut quitter l'algorithme sans avoir atteint la convergence. C peut alors être très différent de C_{Sat} .

– La variable $C_{t+\Delta t}$ est imposée à C_{Sat} par un échange entre le précipité et le soluté. La quantité injectée dans le soluté est ainsi exactement celle qui a été prélevée au

précipité. La précision sur le bilan est égale à la précision machine.

Remarques - Vitesse de convergence

Le principal reproche que l'on peut adresser à cet algorithme est sa lenteur de convergence. Une précision grossière est atteinte très rapidement mais des résultats plus fins réclament un grand nombre d'itérations (plusieurs dizaines). Cependant, la matrice permettant de résoudre l'équation n'est calculée qu'une seule fois ; une itération est donc peu coûteuse en temps. L'enjeu est ensuite de réduire le nombre d'itérations :

– On pourrait trouver intéressant de traiter les cas à *très fort transport* - c'est-à-dire à forte dissolution - en dissolvant tout dès que $P < \varepsilon RC_{Sat}$, puis en résolvant le problème sans limites de solubilité. Or, dans le cas d'une résolution rigoureuse, si P devient inférieur à εRC_{Sat} à un instant donné, quelques pas de temps plus tard $P = 0$. Le calcul avec limite de solubilité ne prendra plus alors qu'une seule itération (autant qu'un calcul sans limites de solubilité). Le gain est donc quasi nul, et interdit de plus une éventuelle reprécipitation, qui est par contre bien décrite par le modèle ci-dessus.

– Prendre un *coefficient de relaxation* différent de 1 n'accélère pas la convergence : Si, au lieu d'initialiser la quantité dissoute pour le prochain pas de temps à la première itération à L_t (en s'assurant bien sûr qu'elle n'excède pas la quantité de précipité disponible), on l'initialise à $0,5L_t$, $0,9L_t$, $1,2L_t$ voire $2L_t$, le nombre d'itérations augmente en général. En effet, la dissolution est le plus souvent en une zone donnée un processus établi en régime quasi-stationnaire. La quantité dissoute pendant un pas de temps est très proche de celle dissoute au pas de temps précédent, sauf lors de rares phases transitoires (épuisement du précipité ou début d'une reprécipitation).

Remarque - Est-il pertinent d'évaluer le terme de dissolution de façon implicite ?

Si on écrit le terme de surcroît de dissolution $\Delta L_{t+\Delta t}^i$ de façon implicite, on est obligé de remanier quelque peu l'algorithme. En effet, l'implication dispense des itérations pour trouver la quantité à dissoudre, l'équation implicite devient :

$$\begin{aligned} & \varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} \\ &= \mathcal{B}(C_t, C_{t+\Delta t}, P, \vec{x}, t) + \frac{1}{\Delta t} \min \left\{ [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t ; \varepsilon R(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}^i) \right\} \end{aligned} \quad (5.51)$$

où $\mathcal{B}(C_t, C_{t+\Delta t}, P, \vec{x}, t) = \text{div} \left(-\overline{\vec{D}} \vec{\nabla} C_{t+\Delta t}^i + C_{t+\Delta t}^i \vec{U} \right) - \varepsilon R\lambda C_t + q$

On peut linéariser le 'minimum' du terme de droite en écrivant qu'il est égal au terme qui était le plus petit lors de l'itération précédente, et vérifier *a posteriori* que ce choix était le bon. On utilise, ici encore, un indicateur I tel que :

$$\min \{a; b\} = Ia + (1 - I)b \text{ où } I = 1 \text{ si } a < b, \text{ et } I = 0 \text{ sinon.} \quad (5.52)$$

Dans le cas présent, l'indicateur de dissolution s'exprime ainsi :

$$I_{t+\Delta t}^i = \begin{cases} 1 & \text{si } [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t < \varepsilon R(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}^{i-1}) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.53)$$

Ainsi, le minimum du terme de droite vaut $[1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t$ lorsque $I_{t+\Delta t}^i = 0$ (il n'y a plus suffisamment de précipité), et $\varepsilon R(C_{Sat} - C_{t+\Delta t}^i)$ lorsque $I_{t+\Delta t}^i = 1$ (il y a suffisamment de précipité). Les itérations portent maintenant sur la présence de précipité en quantité suffisante à $t + \Delta t$, et la convergence sera atteinte, tout comme dans l'algorithme par pénalisation, lorsque l'indicateur I cessera de changer. L'équation sur C à résoudre devient :

$$\begin{aligned} & \varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} \\ &= \mathcal{B}(C_t, C_{t+\Delta t}, P, \vec{x}, t) + (1 - I_{t+\Delta t}^{i-1}) [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} + I_{t+\Delta t}^{i-1} \varepsilon R \frac{C_{Sat} - C_{t+\Delta t}^i}{\Delta t} \end{aligned} \quad (5.54)$$

soit, en reportant l'élément implicite dans le terme de gauche :

$$\begin{aligned} & \varepsilon R(1 + I_{t+\Delta t}^{i-1} + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} \\ &= \mathcal{B}(C_t, C_{t+\Delta t}, P, \vec{x}, t) + (1 - I_{t+\Delta t}^{i-1}) [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} + I_{t+\Delta t}^{i-1} \varepsilon R \frac{C_{Sat} - C_t}{\Delta t} \end{aligned} \quad (5.55)$$

Cette dernière équation est celle à résoudre numériquement pour prendre en compte un terme de dissolution implicite, les itérations étant reportées de la quantité dissoute sur la présence de précipité.

Avec cette écriture, a-t-on vraiment $C = C_{Sat}$ lorsqu'il y a du précipité ?

Admettons qu'il y ait du précipité en quantité suffisante : $I_{t+\Delta t}^{i-1} = I_{t+\Delta t}^i = 1$. Considérons qu'on avait au pas de temps précédent $C_t = C_{Sat}$, ce qu'il est logique de supposer avec un algorithme cherchant à imposer $C = C_{Sat}$ en présence de précipité. On trouve alors l'équation

$$C_{t+\Delta t}^i - C_{Sat} = \frac{\mathcal{B}(C_t, C_{t+\Delta t}, P, \vec{x}, t)\Delta t}{\varepsilon R(2 + \lambda\beta\Delta t)} \quad (5.56)$$

dont le second membre est du même ordre de grandeur – quoique légèrement plus faible – que $\frac{\mathcal{B}(C_t, C_{t+\Delta t}, P, \vec{x}, t)\Delta t}{\varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t)}$, terme de transport sans dissolution, en général bien différent de zéro.

Ainsi, ce nouvel algorithme n'impose pas C à C_{Sat} . On remarque cependant qu'il est équivalent à une dissolution d'ordre 1 implicite avec $\kappa = I/\Delta t$ (voir plus haut, §Prédiction de la présence de précipité). C'est-à-dire que l'écart de C à C_{Sat} est

divisé par e (si P est suffisant) tous les Δt . Autant alors prendre un coefficient de dissolution beaucoup plus grand afin d'imposer C à C_{Sat} , mais cela reviendrait à utiliser l'algorithme par pénalisation.

Il faut donc reconnaître qu'un terme de dissolution implicite avec la méthode par prédiction de la quantité dissoute lorsque l'équilibre de dissolution est instantané n'apporte pas d'élément décisif ni vraiment nouveau.

Comparaison des deux algorithmes

Les résultats issus des calculs avec limite de solubilité en utilisant les deux algorithmes de prédiction de la quantité dissoute ou de prédiction de la présence de précipité sont semblables qualitativement (Voir Figure 5.4 : solubilité à variation exponentielle, et Figure 5.5 : solubilité à variation brutale). De légères différences quantitatives sont décelables. Elles proviennent des différences de précision sur le calcul des concentrations, mais elles ne modifient pas le flux total sortant.

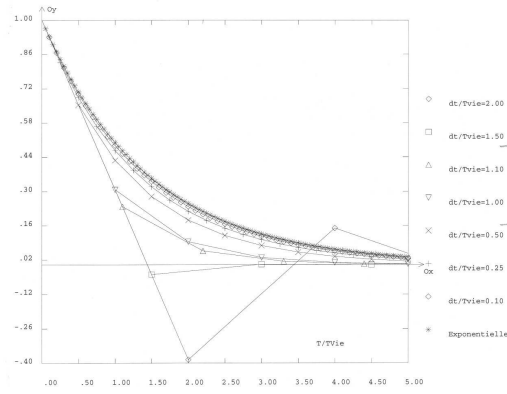
Temps de calcul

Le traitement de la limite de solubilité avec prédiction de la quantité dissoute est peu sensible aux variations spatiales de limite de solubilité. Les nombres d'itérations et les temps de calcul changent peu suivant que la limite de solubilité varie brutalement ou sur une zone étendue; même s'il est vrai qu'une solubilité variable dans l'espace est plus défavorable qu'une solubilité constante du point de vue du nombre d'itération. Par contre, le deuxième algorithme (prédiction de la présence de précipité) est très sensible à l'étendue spatiale de la variation de la limite de solubilité. Il est très efficace lorsque celle-ci varie sur un espace réduit, mais prend beaucoup plus de temps dès que la variation s'opère sur une grande zone.

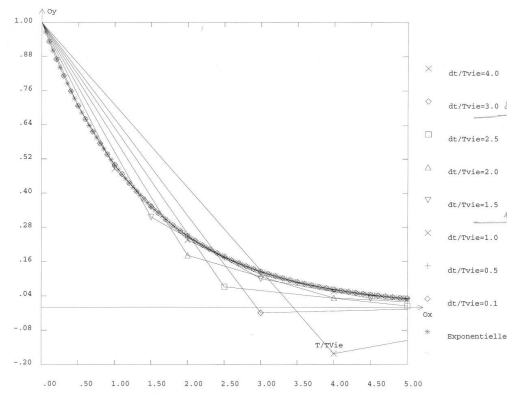
La prédiction de la quantité dissoute se révèle plus lente que la prédiction de présence de précipité lorsque la variation de limite de solubilité est brutale et localisée; c'est l'inverse si cette variation est répartie sur un large domaine.

Tableau Récapitulatif

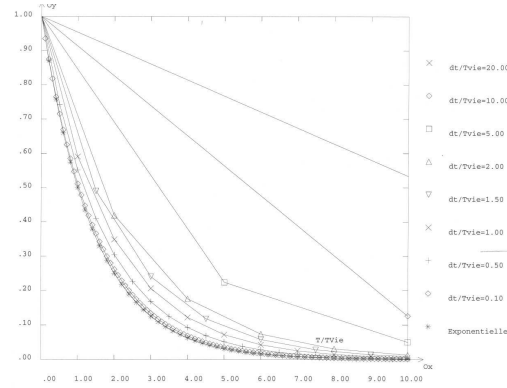
	Prédiction dissolution	Prédiction présence
Précision :	$C \approx C_{Sat}$ à η près	$C \approx C_{Sat}$ à $1/\varpi$ près
Bilan :	précision machine	$\varpi \times$ précision machine
Variabilité spatiale de C_{Sat}	progressives; localisées aussi si η raisonnable	localisées seulement
Validité	Toujours	$P \ll \varpi \Delta t$
Application type	Matrice se dissolvant	tous les autres cas



(a) $\beta = 0$ (explicite), $0.1 < \Delta t/\tau < 2$



(b) $\beta = 1/2$ (Crank-Nicholson), $0.1 < \Delta t/\tau < 4$



(c) $\beta = 1$ (implicite), $0.1 < \Delta t/\tau < 20$

FIG. 5.3: Comparaison, dans le cas de la décroissance seule, des solutions analytique et numériques en fonction du pas de temps adopté et du niveau d'implicitation

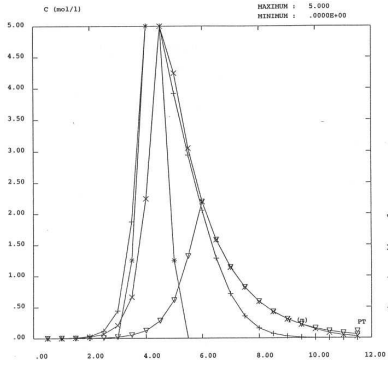
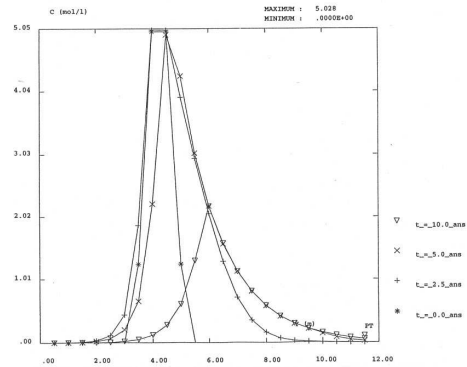
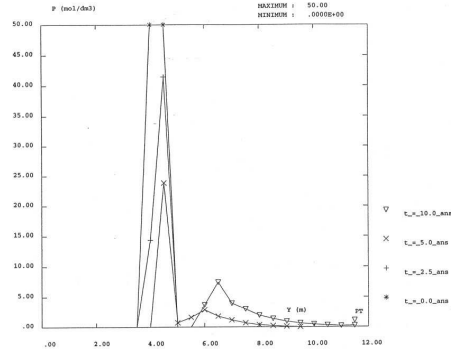
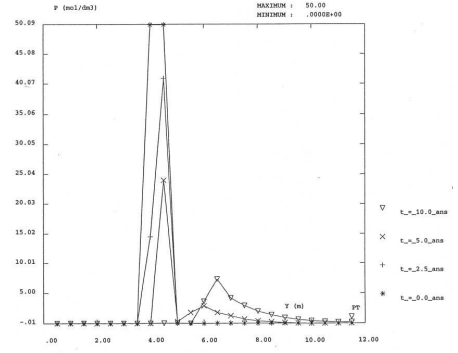
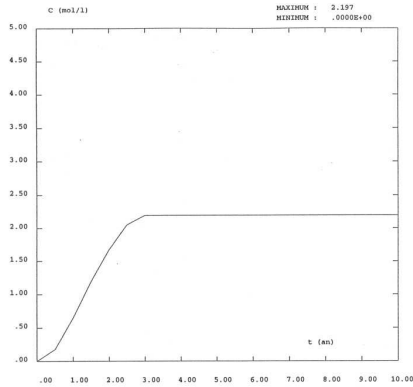
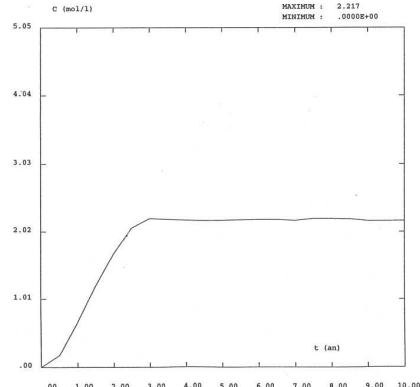

 (a) $C(x=0, y)$, algo. 1

 (b) $C(x=0, y)$, algo. 2

 (c) $P(x=0, y)$, algo. 1

 (d) $P(x=0, y)$, algo. 2

 (e) $C(x=0, y=y_{aval})$, algo. 1

 (f) $C(x=0, y=y_{aval})$, algo. 2

FIG. 5.4: Comparaison des deux algorithmes de dissolution instantanée dans le cas d'une limite de solubilité **décroissant exponentiellement** vers l'aval. A gauche, par indicateur de présence de précipité (algorithme 1), à droite par prédiction de quantité dissoute (algorithme 2). En haut, concentration le long de l'axe de symétrie (C_{Sat} est figurée par des losanges); au milieu, quantité de précipité sur ce même axe; en bas, concentration en un point en aval.

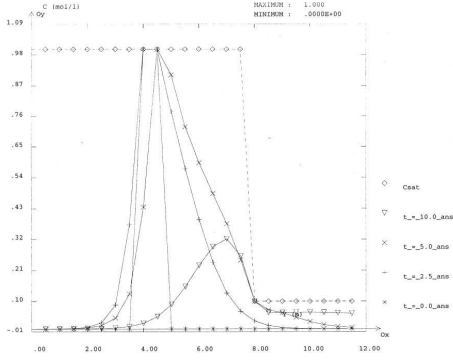
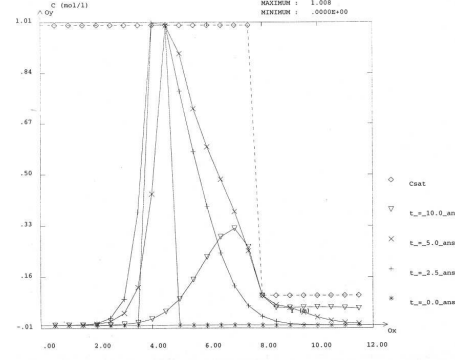
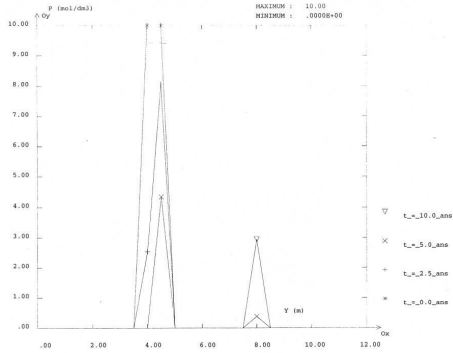
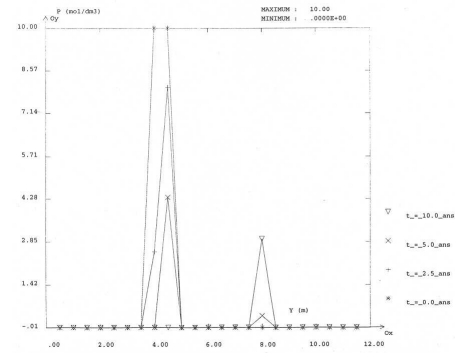
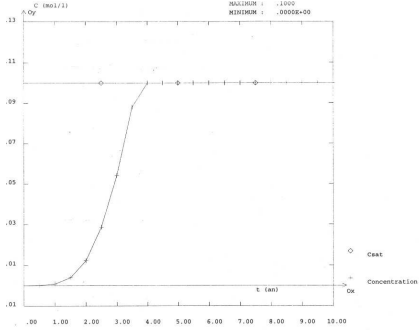
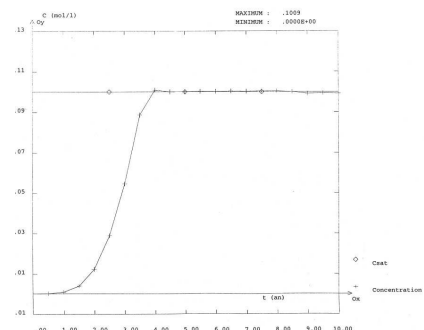
(a) $C(x=0, y)$, algo. 1(b) $C(x=0, y)$, algo. 2(c) $P(x=0, y)$, algo. 1(d) $P(x=0, y)$, algo. 2(e) $C(x=0, y=y_{aval})$, algo. 1(f) $C(x=0, y=y_{aval})$, algo. 2

FIG. 5.5: Comparaison des deux algorithmes de dissolution instantanée dans le cas d'une limite de solubilité à **variation brutale** en aval.

A gauche, par indicateur de présence de précipité (algorithme 1), à droite par prédiction de quantité dissoute (algorithme 2). En haut, concentration le long de l'axe de symétrie (C_{Sat} est figurée par des losanges) ; au milieu, quantité de précipité sur ce même axe ; en bas, concentration en un point en aval.

Limite de solubilité à cinétique d'ordre 1

Bien que les temps soient de l'ordre du millier d'années, la cinétique de dissolution peut être suffisamment lente pour qu'on ne puisse plus utiliser un équilibre de dissolution / précipitation instantané. Inversement, il se peut qu'une dissolution à cinétique imposée constante élevée donne des valeurs de concentration beaucoup trop grandes. Dans l'un ou l'autre cas, il faut temporiser la cinétique de dissolution. On propose ici une loi du premier ordre, où la vitesse de dissolution est d'autant plus faible que C s'approche de C_{Sat} . Elle est identique pour la dissolution et la reprécipitation :

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \kappa(C_{Sat} - C) \\ \frac{\partial P}{\partial t} = -\varepsilon R \kappa(C_{Sat} - C) \text{ avec } P \geq 0 \end{cases} \quad (5.57)$$

Ces équations correspondent à la dissolution seule, à l'exclusion de tout autre phénomène. C se rapproche alors exponentiellement de C_{Sat} . L'écart de C à C_{Sat} est divisé par 2 après $(\ln 2)/\kappa$ années.

D'un point de vue numérique, cela revient à imposer la quantité dissoute L par unité de temps, en s'assurant toutefois qu'elle ne dépasse pas la quantité restante de précipité soluble. Soit γ le coefficient d'implication choisi pour la méthode, la dissolution d'ordre 1 s'écrirait :

$$L_{t+\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \min \{ [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t ; \varepsilon R \kappa(C_{Sat} - C_\gamma) \} \quad (5.58)$$

où $C_\gamma = (1 - \gamma)C_t + \gamma C_{t+\Delta t}$.

On a alors la même difficulté que pour l'algorithme de dissolution instantanée par méthode de pénalisation, puisqu'on ne peut pas linéariser le 'minimum'. La méthode consiste, comme pour la méthode par prédiction de quantité dissoute avec implication (éq. (5.52)), à prédire que le minimum des deux termes vaudra *a priori* l'un d'entre eux (celui que l'on avait pris au pas de temps précédent), quitte à vérifier *a posteriori* que le choix était bon. Si le choix se révèle mauvais, on choisit l'autre terme et on recommence. Il peut y avoir plusieurs itérations successives avant d'obtenir un résultat cohérent.

Présentation de l'algorithme

On utilise un indicateur I valant 1 lorsque le 'minimum' contenu dans l'expression de $L_{t+\Delta t}$ est égal au terme de gauche, et 0 lorsqu'il est égal au terme de droite. I indique en fait s'il y a suffisamment de précipité disponible pour assurer la dissolution d'ordre 1.

1. I_{t_0} = distribution (0 ou 1) du précipité à $t = t_0$.

2. Initialisation d'itération :

$$C_{t+\Delta t}^0 = C_t$$

$$P_{t+\Delta t}^0 = P_t$$

$$I_{t+\Delta t}^0 = I_t$$

3. Pour passer d'une itération $i - 1$ à l'itération i :

▷ Déterminer C et P compte tenu de la disponibilité de précipité de l'itération précédente :

Résoudre l'équation de migration sur C avec une disponibilité $I_{t+\Delta t}^{i-1}$:

$$\begin{aligned} & \varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} \\ &= \text{div} \left(-\overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C_{t+\Delta t}^i + C_{t+\Delta t}^i \vec{U} \right) - \varepsilon R \lambda C_t + q \\ &+ (1 - I_{t+\Delta t}^{i-1}) [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} + I_{t+\Delta t}^{i-1} \varepsilon R \kappa (C_{Sat} - C_\gamma) \end{aligned} \quad (5.59)$$

soit :

$$\begin{aligned} & [\varepsilon R(1 + \lambda\beta\Delta t) + I_{t+\Delta t}^{i-1} \gamma \kappa \Delta t] \frac{C_{t+\Delta t}^i - C_t}{\Delta t} \\ &= \text{div} \left(-\overline{\overline{D}} \vec{\nabla} C_{t+\Delta t}^i + C_{t+\Delta t}^i \vec{U} \right) - \varepsilon R \lambda C_t + q \\ &+ (1 - I_{t+\Delta t}^{i-1}) [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] \frac{P_t}{\Delta t} + I_{t+\Delta t}^{i-1} \varepsilon R \kappa (C_{Sat} - C_t) \end{aligned} \quad (5.60)$$

▷ Calculer le nouveau précipité

$$P_{t+\Delta t}^i = I_{t+\Delta t}^{i-1} \left[\frac{1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t}{1 + \lambda\beta\Delta t} P_t - \frac{\varepsilon R \Delta t \kappa (C_{Sat} - C_\gamma)}{1 + \lambda\beta\Delta t} \right] \quad (5.61)$$

4. Réévaluer la disponibilité du précipité :

$$I_{t+\Delta t}^i = \begin{cases} 1 & \text{si } \varepsilon R \kappa (C_{Sat} - C_\gamma) < [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.62)$$

5. Critère de sortie des itérations :

▷ Si le critère de sortie est vérifié, on adopte $C_{t+\Delta t}^i$, $P_{t+\Delta t}^i$, et $I_{t+\Delta t}^i$ comme valeurs de fin de pas de temps.

$$L_{t+\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} ([1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t - (1 + \lambda\beta\Delta t) P_{t+\Delta t}) \quad (5.63)$$

▷ Si le critère de sortie n'est pas vérifié, on reprend à l'étape n°3.

Stabilité

Considérons, pour cette question, la dissolution progressive seule :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa(C_{Sat} - C) \quad (5.64)$$

s'écrit

$$\frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} = \kappa(C_{Sat} - C_t) \quad (5.65)$$

d'où on déduit la progression géométrique :

$$C_{t+\Delta t} - C_{Sat} = \frac{1 - (1 - \gamma)\kappa\Delta t}{1 + \gamma\kappa\Delta t}(C_t - C_{Sat}) \quad (5.66)$$

On observe donc que C converge vers C_{Sat} au cours du temps si l'écriture ci-dessus est contractante, c'est-à-dire si :

$$\left| \frac{1 - (1 - \gamma)\kappa\Delta t}{1 + \gamma\kappa\Delta t} \right| < 1 \quad (5.67)$$

à savoir :

$$\left(\frac{1}{2} - \gamma \right) \kappa\Delta t < 1 \quad (5.68)$$

D'après cette condition, la convergence est assurée dès que $\kappa\Delta t < 2$ ou $\gamma > 0,5$.

Mais cette condition ne dispense pas d'oscillations autour de C_{Sat} . Si l'on veut que C converge vers C_{Sat} de façon monotone, il faut imposer aussi :

$$\frac{1 - (1 - \gamma)\kappa\Delta t}{1 + \gamma\kappa\Delta t} > 0 \quad (5.69)$$

soit :

$$\boxed{(1 - \gamma)\kappa\Delta t < 1} \quad (5.70)$$

qui est une condition plus restrictive que la précédente.

Remarques

– La dissolution se traduit par un transfert exact de matière entre le précipité et le soluté. La précision du calcul est donc bonne.

– Si l'on choisit un coefficient d'implication $\gamma = 0$ (schéma explicite), $C_\gamma = C_t$ et ne varie pas au fil des itérations. Par voie de conséquence, I reste égal à $I_{t+\Delta t}^0$. Il y aura alors au maximum deux itérations (s'il y a changement d'état dans la présence de précipité, une seule itération sinon), la réciprocité du couplage transport-dissolution étant supprimée.

Exemples

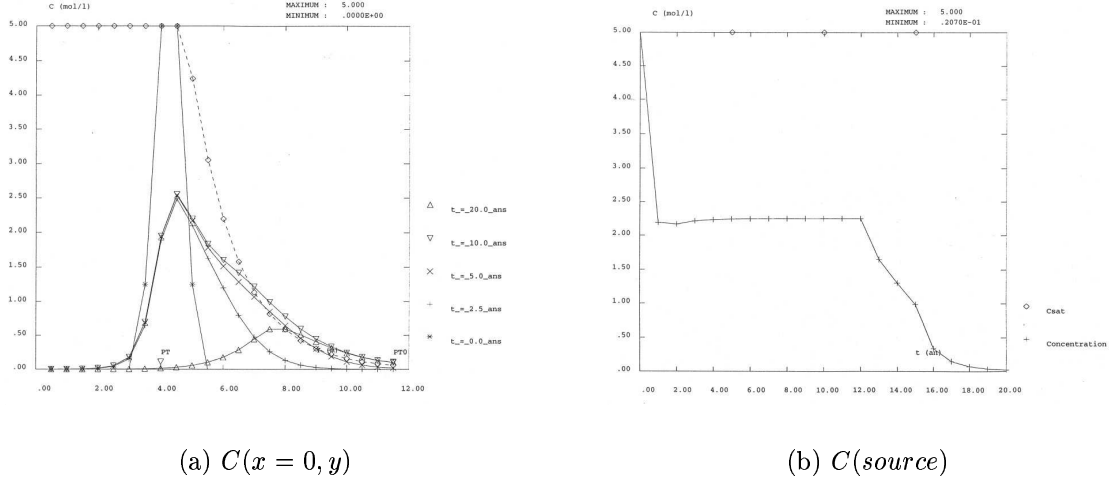


FIG. 5.6: Exemple de dissolution à cinétique d'ordre 1, avec convection et **variation exponentielle** de C_{Sat} (figurée par des losanges). A gauche, concentration le long de l'axe de symétrie ; à droite, concentration en un point de la source.

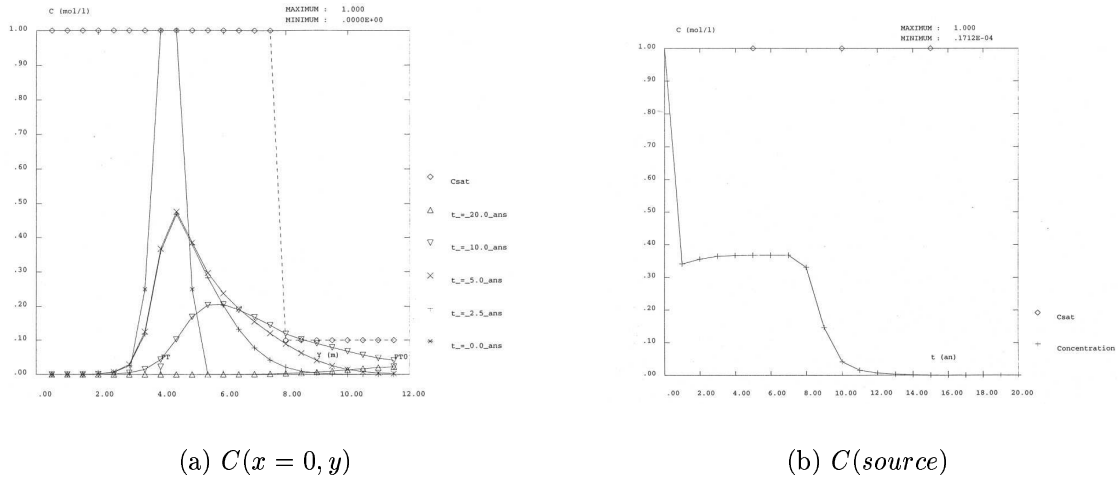


FIG. 5.7: Exemple de dissolution à cinétique d'ordre 1, avec convection et **variation brutale** de C_{Sat} (figurée par des losanges). A gauche, concentration le long de l'axe de symétrie ; à droite, concentration en un point de la source.

Les Figures 5.6 et 5.7 montrent des exemples de calcul avec κ tel que l'écart de C à C_{Sat} soit divisé par deux en 0,5 an ($\kappa = \ln 2 / 0,5 \text{ an}^{-1}$). La limite de solubilité varie brutalement d'un facteur 10 dans le premier exemple. Dans le second, elle varie exponentiellement, avec une décroissance radioactive de période 7 ans. On a choisi de prendre $\gamma = 0$.

On observe un faible franchissement de la barrière de précipitation ($C > C_{Sat}$) et l'établissement en aval d'un régime permanent aussi longtemps qu'il reste du précipité, où C est nettement inférieur à C_{Sat} . On constate d'ailleurs que $C \approx C_{Sat}/2$

pendant ce régime, ce qui n'est guère surprenant puisque la valeur de κ avait été choisie à cette fin. Dans les zones d'afflux, $C > C_{Sat}$; et dans les zones de départ, C est nettement inférieur à C_{Sat} .

Dissolution constante imposée

Dans le cas où l'on cherche à imposer la dissolution L à un certain taux r , on ne peut pas se contenter d'écrire $L_{t+\Delta t} = r(t)$ car il faut s'assurer que la quantité totale que l'on va ainsi dissoudre soit égale à la quantité initiale de précipité restant. En effet, le temps d'épuisement de cette matrice ne coïncide pas nécessairement avec un temps de calcul.

$$L_{t+\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \min \left\{ [1 - (1 - \beta)\lambda\Delta t] P_t ; \sum_t^{t+\Delta t} r(t') dt' \right\} \quad (5.71)$$

5.2.3 Limites de la modélisation

L'utilisation du modèle et des algorithmes présentés suppose que l'on reste dans leurs domaines de validité. Or, même en supposant que les critères de stabilité et de validité soient satisfaits, il peut subsister des erreurs propres au modèle et non à son utilisation :

5.2.3.1 Difficulté de satisfaire toutes les conditions de validité

Prenons par exemple le nombre de Fourier de maille (éq. (5.21)), dont on rappelle ici l'écriture : $Fo = \frac{2D}{\ell^2} \frac{\Delta t}{\varepsilon R}$.

Lorsqu'il y a un très fort contraste spatial dans les valeurs de εR ou de D (surtout R qui est éminemment variable), il peut devenir délicat de trouver un pas de temps Δt tel que Fo soit autour de 1. Même si le calcul est implicite, on peut obtenir des valeurs incorrectes – par exemple négatives – de la concentration. Au bout d'un certain nombre de pas de temps, les valeurs calculées redeviennent en général raisonnables. Il est difficile d'apprécier l'impact de ces périodes de stabilisation sur le résultat à long terme d'un calcul.

Le modélisateur peut éventuellement s'en sortir par des considérations physiques lorsque, par exemple, il n'est intéressé que par un état stationnaire, ou alors lorsqu'il est prêt à sacrifier la positivité des concentrations dans une zone de peu d'intérêt. Dans ce dernier cas, toutefois, il n'est pas évident, notamment en 1D et 2D, que les résultats obtenus sur toute la zone ne soient pas "contaminés" par des concentrations négatives dans un espace même marginal.

5.2.3.2 Écriture d'un terme source volumique

Dans la modélisation aux éléments finis mixtes hybrides (EFMH), l'inconnue principale est la trace de concentration, dont les supports géométriques sont les centres des faces de chaque maille. Un terme source volumique appliqué sur un élément entier doit donc d'une façon ou d'une autre être converti en termes sources linéiques appliqués aux points supports de la trace de concentration, donc aux frontières avec les mailles voisines (Cf. figure 5.8).

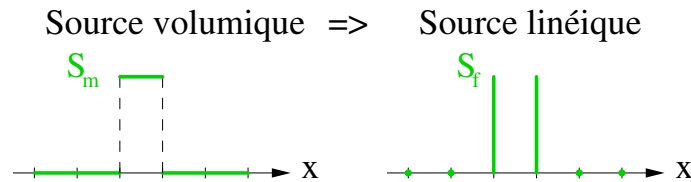


FIG. 5.8: Prise en compte de termes sources volumique en EFMH. Les tirets représentent les noeuds de ce maillage 1D.

Cet effet entraîne deux vices de traitement lors de la prise en compte de limites de solubilité, selon que l'on précipite, ou que l'on dissout :

Concentrations négatives générées par une reprécipitation brutale

Lorsque la limite de solubilité diminue brutalement d'une maille en amont à une maille aval voisine, il est très probable que le soluté précipite dans la maille aval. On observe, lorsqu'il y a reprécipitation massive, des concentrations négatives en aval de la cellule où le précipité se forme (Voir Figure 5.9). Van der Lee (1997) qualifie cet effet de "bien connu". Je l'illustre ici dans le contexte particulier des EFMH.

L'interprétation suivante semble raisonnable :

Une reprécipitation est un transfert de matière du soluté vers le précipité. Elle se concrétise donc par un terme source négatif pour le soluté à appliquer à l'ensemble de la maille. Or un terme source négatif dans une maille est équivalent, d'un point de vue de la trace de concentration, à un pompage de matière dans les mailles voisines, indépendamment de la présence ou non de soluté en quantité suffisante dans les celles-ci. La répartition de ce pompage dépend des propriétés de diffusion et de convection. Aussi, lorsque la propagation de matière se fait de la gauche vers la droite - par exemple sous l'effet de la diffusion - la maille de gauche aura une concentration élevée et celle de droite une concentration faible. Pourtant les débits, correspondant au terme source négatif de la maille centrale, et que ces deux mailles devront assurer, seront égaux. Au pas de temps suivant, la concentration dans la maille de droite sera négative, pour peu que la reprécipitation soit importante (voir

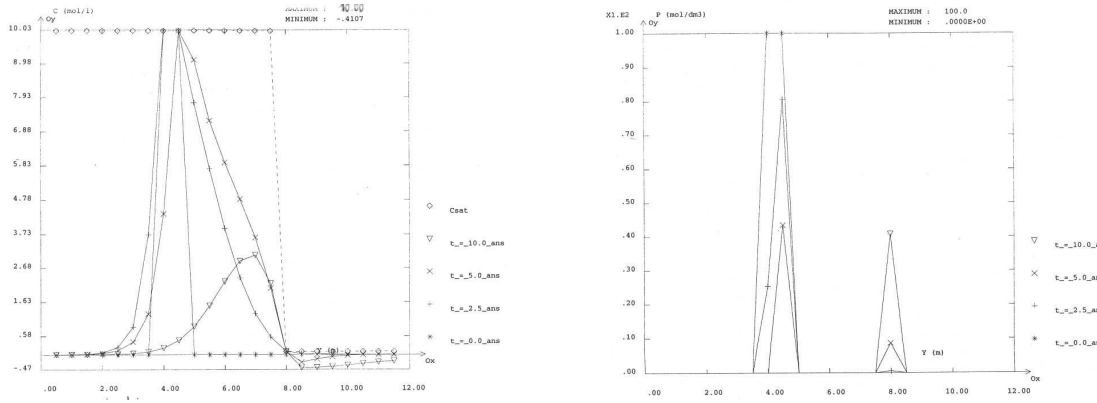
(a) $C(x = 0, y)$ (b) $P(x = 0, y)$

FIG. 5.9: Apparition de concentrations négatives par précipitation. Cas d'une chute brutale de limite de solubilité en aval. A gauche, concentration le long de l'axe de symétrie ; à droite, quantité de précipité.

figure 5.10).

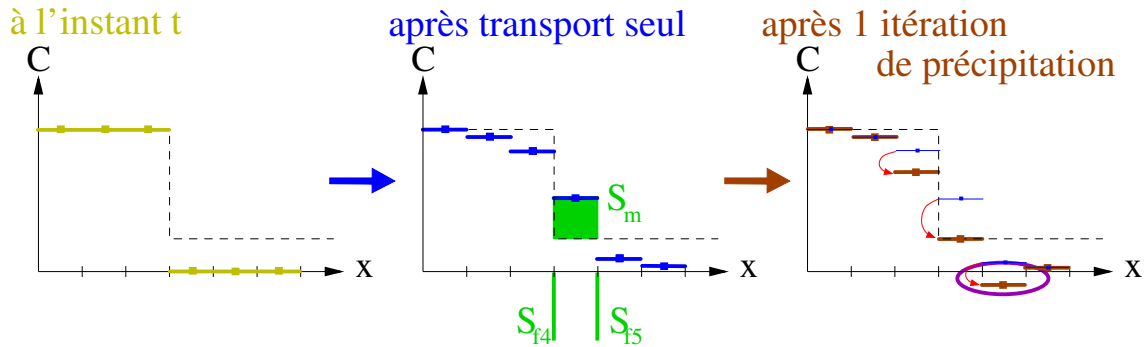


FIG. 5.10: Mécanisme d'apparition de concentrations négatives en EFMH avec un terme de puits (forte reprécipitation).

En pointillés, la limite de solubilité, décroissant brutalement vers l'aval. Les carrés représentent les valeurs moyennes définies aux centres des éléments. Seul l'impact du terme de précipitation de la 4e maille est représenté.

Ce n'est donc pas un problème propre à la prise en compte de limite de solubilité, mais plus généralement à l'usage d'un terme source négatif par la méthode d'éléments finis mixtes hybrides. Pour y remédier, il faudrait que la traduction en terme de flux d'un terme source négatif dans une maille dépende de la disponibilité des mailles voisines.

Ce point méritera d'être étudié en détail, car des concentrations négatives, appa-

raissant même temporairement et en peu de points, peuvent remettre en cause l'ensemble des résultats d'un calcul. De plus, dans le cas d'une diminution abrupte de limite de solubilité, les concentrations négatives nées en aval du front contaminent rapidement le reste aval du domaine et engendrent par conséquent un flux sortant négatif! Il y a ainsi création de matière alors qu'on s'attendait à une évacuation.

Heureusement, une chute de la limite de solubilité suffisamment brutale (un facteur 100 sur une longueur de maille) pour obtenir des concentrations négatives n'est absolument pas physique. Les variations spatiales des grandeurs chimiques sont en général étalées dans l'espace et d'un ordre de grandeur plus faible. Cependant le cas test présenté dans ce paragraphe permet de soulever la question de l'écriture de termes sources volumiques en élément finis mixtes hybrides.

Reprécipitation amont générée par une dissolution aval

Un problème connexe apparaît en cas de dissolution d'un front. La dissolution dans une maille se concrétise par un terme source positif réparti dans la maille puis converti en termes sources linéiques positifs sur les faces de la maille. Les mailles amont et aval bénéficient d'une partie de ce terme source. On observe ainsi une reprécipitation dans la maille immédiatement en amont de celle qui s'était dissoute. Dans un cas illustratif 1D (voir figure 5.11), une moitié environ de l'excédent dissout est transmise à la maille aval pour y être transportée, l'autre moitié est stockée dans le précipité de la maille amont. En fin de compte, le front s'est dissout 50 % plus vite. Mais la concentration dans la maille aval étant ainsi plus élevée, le gradient de concentration et donc le transport seront plus faible au pas de temps suivant. Finalement, on peut dire que la dissolution du front et le transport sont entre 0 et 50 % plus rapide que ce qu'ils devraient être.

5.2.3.3 Erreurs de bilan de masse ?

Le bilan de masse d'un calcul est l'écart entre ce qu'on a mis dans chaque cellule et ce qui s'y trouve effectivement. On calcule pour cela les contributions des différents phénomènes : transport, décroissance, éventuellement dissolution/précipitation ; et on compare avec la variation effective de la quantité d'élément. Ceci, pour le soluté en chaque maille, et globalement en faisant l'intégrale sur le domaine entier. On a ainsi un ordre de grandeur du cumul des imprécisions numériques au fil des pas de temps et des itérations.

Trois exemples illustrent les erreurs de bilan auxquelles on a typiquement affaire :

- Cas-test avec solubilité en créneau et résolution par la méthode de prévision de la quantité dissoute. La Figure 5.12 montre les erreurs élémentaires et cumulées dans le cas défavorable d'une variation brutale de la limite de solubilité.

A chaque pas de temps, on fait une erreur numérique relative à la quantité initiale comprise entre 10^{-18} et 10^{-17} , ce qui est égal à la précision machine dans notre

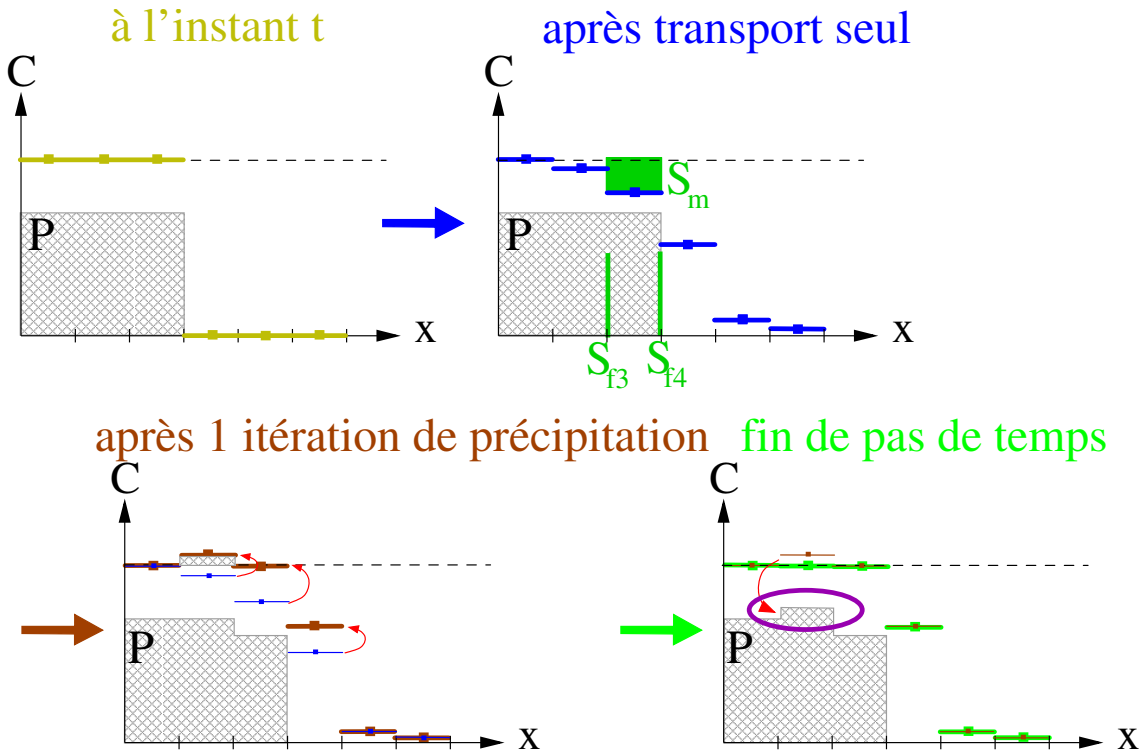
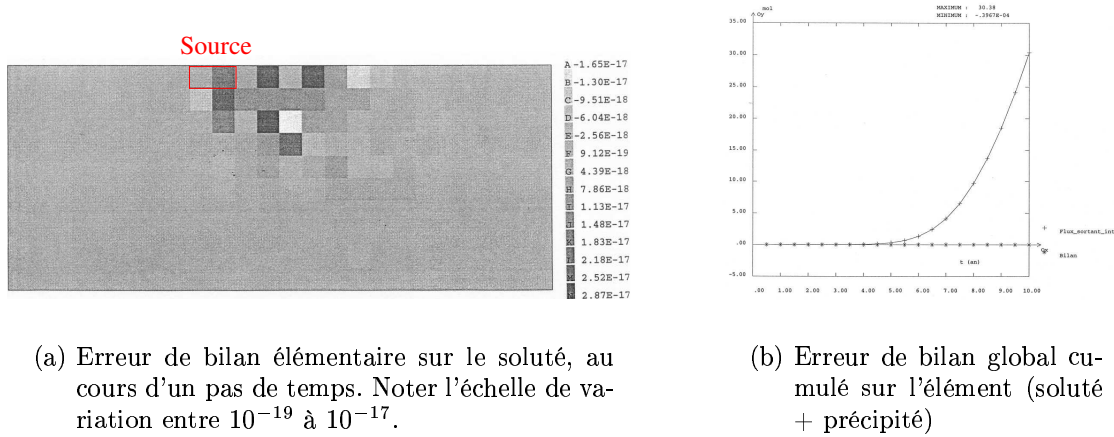


FIG. 5.11: Description du mécanisme de reprecipitation amont, en EFMH.

La limite de solubilité est ici uniforme. En hachuré, le précipité. Les carrés représentent les valeurs moyennes par élément. Seul l'impact du terme de dissolution/précipitation de la 3e maille est représenté.

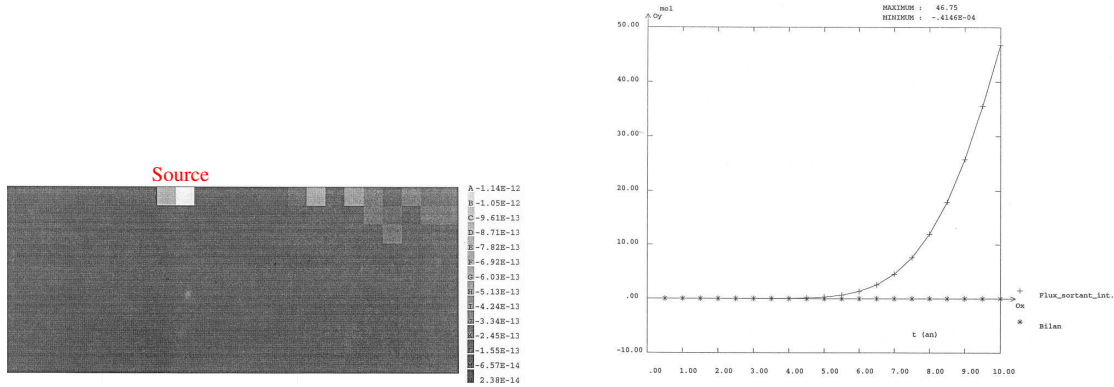

 (a) Erreur de bilan élémentaire sur le soluté, au cours d'un pas de temps. Noter l'échelle de variation entre 10^{-19} à 10^{-17} .

(b) Erreur de bilan global cumulé sur l'élément (soluté + précipité)

FIG. 5.12: Erreur de bilan dans le cas d'une limite de solubilité à variation brutale et une résolution par prévision de la quantité dissoute.

cas. Après 20 pas de temps, l'erreur globale cumulée et le flux sorti sont dans un rapport de 10^{-7} .

- Cas-test avec solubilité décroissant exponentiellement et résolution par la méthode de prévision de présence de précipité avec pénalisation. La Figure 5.13 montre les erreurs élémentaires et cumulées dans le cas défavorable d'une variation progressive de la limite de solubilité.



(a) Erreur de bilan élémentaire sur le soluté, au cours d'un pas de temps. Noter l'échelle de variation entre 10^{-14} à 10^{-12} .

(b) Erreur de bilan global cumulé sur l'élément (soluté + précipité)

FIG. 5.13: Erreur de bilan dans le cas d'une limite de solubilité à variation exponentielle et une résolution par indicateur de présence de précipité.

A chaque pas de temps, on fait une erreur numérique relative à la quantité initiale comprise entre 10^{-14} et 10^{-12} ; c'est à dire 10 000 fois plus grande que lorsque l'on utilise le précédent algorithme de dissolution. Après 20 pas de temps, l'erreur globale cumulée et le flux total sorti sont encore dans un rapport de 10^{-7} .

- Cas-test sans limite de solubilité, mais avec décroissance.
Sur cet autre cas-test (non représenté), on observe après 20 pas de temps une erreur globale intégrée encore de l'ordre de 10^{-7} fois le flux total sorti.

On voit donc que le traitement de la limite de solubilité n'est pas la cause première des erreurs de bilan, ou en tout cas qu'elle n'alourdit pas particulièrement l'erreur numérique. Dans l'exemple proposé, la méthode par pénalisation conserve un bilan correct. Ce n'est cependant pas toujours le cas.

D'une façon générale, et à condition d'utiliser l'algorithme de précipitation par pénalisation dans son domaine d'efficacité lorsqu'on a choisi de s'en servir, le bilan reste très bon, même après un calcul long.

Conclusion

Le modèle présenté ici permet de calculer le transport d'une chaîne de radioéléments en prenant en compte les effets physiques essentiels comme la décroissance radioactive, les limites de solubilité avec ou sans cinétique et un équilibre de sorption instantané linéaire (K_d). Il permet aussi de modéliser tout problème physique d'écriture mathématique équivalente; ce qui en fait un outil puissant par sa généralité.

Les éléments clefs de l'outil numérique implémenté dans Cast3M sont les suivants :

- La modélisation s'appuie sur une résolution aux Éléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH), mais les algorithmes présentés sont en fait indépendants de la formulation numérique. Les calculs sont conservatifs et les bilans de matière sont très précis.
- Le traitement implicite de la convection et de la diffusion accroît la stabilité. Leur précision requiert toutefois d'être attentif aux critères sur les discrétisations spatiale et temporelle.
- Deux algorithmes de prise en compte de limite de solubilité instantanée ont été étudiés. Ils sont complémentaires car chacun se prête à des configurations physiques et numériques différentes suivant la variabilité spatiale de la limite de solubilité et la quantité initiale de précipité.
- Il est possible de choisir une cinétique de dissolution à l'ordre 1. Un algorithme implicite avec itérations est alors utilisé. Il est également possible d'imposer un taux de dissolution.

Ce travail d'implémentation a permis de préciser les critères de précision et de stabilité de l'écriture numérique des différents processus. En particulier, la limite inférieure à la valeur du nombre de Fourier numérique – qui quantifie le nombre de mailles traversées par diffusion pendant un pas de temps – contraint fortement la discrétisation du problème. Car si le nombre de Fourier est trop petit, le principe de conservation des extrema peut être enfreint (en EF comme en EFMH). Concrètement, des concentrations négatives apparaissent et se maintiennent, qui sont rédhibitoires lorsque leur amplitude n'est plus négligeable. Il existe aussi des critères de précision, et de stabilité (suivant le niveau d'implicitation) pour la décroissance et la dissolution à cinétique d'ordre un, dont je donne l'expression et la philosophie d'usage. Dans certains types de problèmes, la précision est maximale en semi-implicite, mais on peut aussi se servir d'un niveau d'implicitation par maille ou par zone qui maximise la précision.

Les EFMH ont prouvé leur capacité à modéliser l'ensemble des phénomènes prescrits, grâce notamment à des algorithmes de Picard, au prix cependant de difficultés qui leurs sont propres. En effet, la prise en compte de termes sources est telle qu'ils sont en fait "diffusés", en implicite, sur les mailles voisines. Ceci peut être à l'origine de l'apparition de reprécipitation amont, qui ne pose pas vraiment de problème, ou de sur-précipitation aval, qui peut faire naître des concentrations négatives artifi-

ciellement, surtout lorsque la limite de solubilité décroît vers l'aval. Pour résoudre ce problème, on pourrait décentrer le terme source de précipitation vers l'amont, de façon à ôter du soluté là où il est présent en quantité suffisante.

Conclusion Générale

Ce mémoire a retracé mon travail de recherche de plusieurs années en l'hydrogéologie. Les thèmes abordés sont variés, mais ont tous trait au milieu poreux, avec comme problématique sous-jacente la fin de vie des déchets radioactifs de haute activité. L'accent a été mis sur plusieurs points : (i) les phénomènes physiques complexes ayant lieu en écoulement diphasique avec les deux constituants eau et air ; (ii) la complexité du milieu géologique à travers son hétérogénéité dans son influence sur l'écoulement et le transport d'un panache de polluant ; et (iii) des méthodes numériques fines pour traiter des processus précis. Reprenons rapidement les conclusions principales.

En vue de comprendre les sollicitations que pourrait endurer un milieu géologique accueillant un site d'entreposage longue durée de colis radioactifs chauds, un modèle thermo-hydraulique d'écoulement diphasique eau-air a été établi et implémenté. L'appui à la maquette expérimentale MASCILIA a servi d'illustration pour tester qualitativement le modèle numérique. On observe bien la formation d'une bulle de vapeur autour de la source chauffante, dans le sable initialement saturé d'eau. Cette bulle est plus développée vers le haut, du fait de la flottabilité de la vapeur chaude, et se déforme vers l'aval au gré d'un éventuel écoulement transverse imposé en supplément. En revanche, la validation sur les résultats expérimentaux, qui n'étaient pas alors disponibles, n'a pas pu être menée.

Au-delà de cette application du modèle, l'intérêt du travail réside dans la la signification que l'on donne à certaines grandeurs physiques, au demeurant bien identifiées pour des cas simples. Ainsi, il s'avère qu'un certain nombre d'hypothèses est nécessaire pour décrire l'état d'équilibre d'une phase liquide en milieu poreux à l'aide de la charge hydraulique : (i) l'eau est pure ou contient une très faible fraction dissoute sans réaction chimique ; (ii) l'eau est non sorbante à la surface du solide, ce qui n'exclut pas la présence d'un différentiel de tension superficielle par rapport à une phase air, et donc l'existence d'une pression capillaire ; (iii) la pression osmotique est négligeable ; et (iv) le milieu est localement isotherme. De plus, pour utiliser le potentiel matriciel – généralisation de la charge hydraulique qui tient compte de la pression osmotique et d'un potentiel réversible de sorption – comme potentiel d'écoulement dans une loi de type Darcy, il faut accepter le principe d'une seule et même perméabilité hydraulique sous l'effet des pression, sorption, gravité et osmose. En conditions anisothermes, il faut obligatoirement s'appuyer sur l'énergie de Gibbs ou enthalpie libre. De même, l'usage d'un gradient de charge pour une phase gazeuse

est sérieusement remis en question. En effet, même si l'on sépare ce gradient entre un gradient de pression de gaz et la direction de la gravité pour tenir compte de la compressibilité du gaz, il est en outre nécessaire que : (i) le gaz ait un seul constituant, ou une fraction marginale d'autres constituants ; (ii) les variations relatives de pression totale de gaz soient faibles ; et (iii) le milieu soit isotherme. En ce qui concerne les transferts diffusifs de constituants en phase gazeuse, on rappelle que la loi de Fick écrite avec des gradients de fraction massique introduit une variation de la pression totale de gaz. Cette variation peut être compensée par la diffusivité hydraulique, si cette dernière est suffisamment importante. Mais on préférera néanmoins l'usage de gradients de fraction molaire, qui conservent la pression totale de gaz. On a également exploré comment l'existence d'une pression capillaire dédouble la courbe, habituellement droite, d'équilibre liquide-vapeur du diagramme de phase de l'eau.

D'un point de vue numérique, le modèle utilise la succion – opposée de la pression capillaire exprimée en mètres d'eau – parmi ses variables principales. Or, la disparition d'une phase rend en principe caduc son usage. C'est pourquoi je propose d'utiliser une pression fictive de la phase disparue, qui maintienne sa continuité, et qui permette de conserver le même jeu d'écriture. Enfin, la nécessité d'imposer en conditions aux limites des flux partiels d'eau, n'intégrant que le gradient de la variable utilisée dans la résolution, a permis de souligner la dépendance, en Éléments Finis Mixtes Hybrides, des traces d'une variable au champ de perméabilité qui a été utilisé pour son calcul. C'est pourquoi on ne peut utiliser les traces de charge, obtenues avec une certaine perméabilité, pour calculer des débits aux faces correspondant à une autre perméabilité. Une micro-résolution doit être conduite à cette fin, qui donne un débit cohérent avec la charge au centre, les traces de charge et la nouvelle perméabilité. Il a été parfois délicat de faire converger l'algorithme de Picard, et il a fallu modifier le schéma pour réduire le poids relatif de certains termes extra-diagonaux. Même si l'implémentation réalisée dans Cast3M prête le flanc à certaines des critiques faites plus haut, on espère que ces travaux se révéleront utiles à ceux qui cherchent à modéliser des écoulements thermo-hydrauliques en milieu poreux.

La prise en compte, par méthode stochastique, de l'hétérogénéité d'un milieu poreux 2D dans l'écoulement et le transport a été motivée par la volonté de comprendre comment se propage un panache de polluant radioactif issu d'un site de stockage. La modélisation, plus modeste, du transport au sein d'une fracture "isolée" en milieu granitique est un défi, en particulier parce que les écoulements forcés y sont fortement non uniformes.

J'ai mis au jour l'impact de la présence de conditions aux limites, en retrouvant au passage les quelques résultats de mes prédécesseurs. L'étude détaillée, par méthode Monte-Carlo et aussi analytiquement, montre que la charge hydraulique peut être affectée sur de longues portées, mais que les moyennes et variances de la vitesse de Darcy ne s'en ressentent que sur de courtes distances. Le transport particulaire a été examiné grâce à l'analyse d'un panache issu d'un seul point de lâcher. *L'impact*

à longue portée sur le transport paraît alors évident. En particulier, la dispersion transverse dépend fortement de la nature et de la distance des conditions aux limites transversales. La dispersion longitudinale est de son côté peu influencée par des conditions amont et aval de charge, mais très fortement ralentie lorsque ces conditions aux limites s'appliquent au flux hydraulique. Il semble cependant que la structure statistique de position reste gaussienne dans tous les cas, pourvu que la distance de parcours soit suffisante. La distance minimale pour obtenir cette gaussianité dépend de l'amplitude de l'hétérogénéité, et est de l'ordre de quelques longueurs de corrélation. Ainsi, la variabilité de la charge, de la vitesse de Darcy et de la position de particules, et donc de la concentration d'un traceur, du fait des hétérogénéités du milieu poreux, dépend étroitement de la proximité d'un élément déterministe comme (i) la surface, (ii) une fracture colmatée ou circulante, (iii) une interface imperméable, (iv) un puits de pompage, pour ne citer que ces quelques exemples. C'est pourquoi cette étude était un préliminaire indispensable à l'interprétation des résultats de l'étude suivante, portant sur la dispersivité en écoulement non uniforme.

En effet, le modèle linéarisé désormais classique de Dagan exprime la dispersivité d'un panache de particules en fonction des propriétés statistiques des fluctuations de vitesse de Darcy. Logiquement, donc, ces statistiques dépendent de la forme de l'écoulement moyen; et donc, la dispersivité s'en ressent aussi. J'ai montré, en m'appuyant sur des écoulements allant du quasi-uniforme au tournant abrupt, ainsi que sur les écoulements induits par la présence d'un puits de pompage ou d'un pompage dipolaire, comment *l'étalement d'un panache de particules dépend de l'intensité et de la nature de la non-uniformité*. Par exemple, la dispersivité transverse tend vers zéro vers un puits de pompage, tandis que la dispersivité longitudinale tend vers l'infini. Ces résultats sont correctement prévus par une intégration analytique. Il en ressort que *la dispersivité n'est pas une propriété intrinsèque au milieu poreux*, c'est-à-dire mesurable sous certaines conditions et utilisable dans d'autres, puisqu'elle dépend de l'écoulement qui traverse le milieu. De plus, cette grandeur ne suffit plus à décrire le panache dès lors qu'il n'est plus gaussien – situation avérée en présence d'un puits de pompage ou d'injection. Enfin, puisqu'elle n'atteint pas de valeur asymptotique, on ne peut s'appuyer sur une seule valeur, mais plutôt sur une courbe, qui dépend à la fois du niveau d'hétérogénéité du milieu, de la position du point de lâcher, de l'écoulement moyen, et parfois aussi de la nature de la condition imposée au(x) puits (rabattement ou débit, qui ont statistiquement des effets différents). Ceci étant dit, au milieu de toutes ces réserves, l'hypothèse d'écoulement uniforme tire son épingle du jeu dans une mesure très précise et limitée. En effet, la courbe de restitution d'un puits de pompage, avec éventuellement un puits d'injection, fournie par un écoulement uniforme honorant le temps moyen d'arrivée, se cale remarquablement bien sur les courbes simulées. En d'autres termes, on peut légitimement interpréter un test de pompage (et peut-être aussi dipolaire) à l'aide d'un modèle d'écoulement uniforme en vue d'en déduire des propriétés statistiques de la transmissivité hydraulique, et à cette fin seulement, car on ne peut espérer obtenir par ce biais

d'information utilisable pour le transport. Il en ressort qu'*en dehors de cas limites, la notion de dispersivité devrait être écartée au profit d'approches alternatives.*

Toujours dans le cadre de la modélisation du transport en milieu poreux, les approches numériques de deux phénomènes particuliers ont été approfondies. Il s'agit dans l'un et l'autre cas de transport avec convection et diffusion.

La première méthode décrit un algorithme que j'ai mis au point, et qui est basé sur une description lagrangienne du transport. Il expose une façon d'introduire un bruit blanc diffusif représentant une diffusion moléculaire et une micro-dispersion, avec comme particularité le *principe de localité du transport à chaque maille*. Le pas de temps de saut de particule est calé de façon à retomber pile sur les faces traversées. On montre que, de cette façon, on s'affranchit d'éventuelles accumulations de particules aux interfaces entre zones à fort contraste de diffusion. Une des difficultés était de gérer correctement les cas particuliers en 2D et 3D, notamment pour décider depuis quelle maille repart la particule. Cette implémentation permet de s'attaquer à des problèmes de transport à convection dominante, tout en modélisant correctement la diffusion, en contraste avec les méthodes eulériennes qui introduisent souvent une forte diffusivité numérique dans les cas à forts Peclets. Néanmoins subsiste la difficulté de la représentativité d'un panache lagrangien en terme de concentration, car il faut d'autant plus de particules que le panache est étalé. On est donc limité à des cas où la diffusion reste faible en absolu (et non relativement à la vitesse).

La deuxième méthode traite des interactions géochimiques simples comme la précipitation/dissolution d'une espèce ainsi que sa décroissance radioactive. J'ai mis en oeuvre algorithme de Picard qui permet de résoudre ce problème non linéaire à deux équations couplées, pour différentes cinétiques de dissolution. Lorsque l'équilibre chimique est instantané, j'impose $C = C_{sat}$ soit par pénalisation, qui a pour inconvénient d'introduire une erreur sur les bilans de masse, soit par prévision itérative de la quantité de précipité à dissoudre, qui a pour inconvénient d'approcher la limite de solubilité C_{sat} sans jamais l'atteindre, mais qui préserve les bilans. Le premier algorithme est bien adapté aux variations brutales de limite de solubilité et aux situations où les zones de présence de précipité changent peu dans le temps, mais pas aux fortes quantités de précipité. Le second converge lentement en présence de fronts de dissolution, mais est toujours valide. Ils sont donc complémentaires. Cette étude a aussi été l'occasion de mettre à plat les critères de précision et de stabilité des différents schémas numériques pour chaque terme intervenant dans l'équation de transport. *Le choix du pas de temps, de la discrétisation spatiale ou de l'implication de tel ou tel terme est épineux, car il est difficile de satisfaire tous les critères, sauf si l'on consent à des simplifications physiques*, par exemple lorsque la durée de vie d'un isotope est très faible par rapport aux temps caractéristiques de transport. J'ai mis en évidence dès 1996 l'apparition de concentrations négatives dues à la non-conservation du maximum par l'écriture de la diffusion en EFMH quand le nombre de Fourier est inférieur à un certain seuil (de l'ordre 1/3 ou 1/6 suivant la définition). Cette propriété, que l'on retrouve également pour les Éléments Finis standards, a été démontrée plus

tard par Hoteit et al. (2002) et Joly (non daté). Une reprécipitation excessive en aval d'une chute brutale de C_{sat} engendre également des concentrations négatives. Ceci est dû au partage avec les éléments voisins des débits aux faces correspondant à un terme source appliqué sur une maille, et est spécifique aux EFMH. Pour la même raison, une reprécipitation excédentaire a lieu en amont des mailles qui se dissolvent. De façon plus large, un terme d'échange entre le soluté et une phase fixe, ainsi que la décroissance radioactive revêtent un caractère mathématique assez général. Pour ne citer qu'un exemple, la dégradation naturelle de bactéries en milieu poreux subit également un prélèvement proportionnel à la quantité présente sur le moment. Mais le système d'équation est tellement générique qu'on peut imaginer des applications à d'autres sphères de l'écosystème.

En définitive, les différentes approches physiques, stochastiques et numériques exposées dans ce travail sont complémentaires. Avec la pratique expérimentale et la mise en œuvre de méthodes inverses et d'interpolation, on a un ensemble cohérent minimal pour modéliser en pleine connaissance de cause le fonctionnement d'un système hydrogéologique naturel. Les défis à relever en la matière, et qui ont été esquissés en introduction, sont nombreux, formidables et stratégiques pour l'avenir de l'humanité sur notre planète, tant la ressource en eau est sollicitée dans sa quantité et sa qualité. Son exploitation doit être raisonnée et ces travaux y auront, je l'espère, contribué.

Bibliographie

- [Addison et al. 2000] P.S. ADDISON, A.S. NDUMU, B. QU, *A fast non-fickian particle-tracking diffusion simulator and the effect of shear on the pollutant diffusion process*, in Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 34, pp 145-166 (2000)
- [Auriol 1994] F. AURIOL - *Calculs de trajectoires*. Internal communication CEA, n°DMT/94/707 (1994)
- [Azizi 1988] S. AZIZI, *Conductivité thermique des matériaux poreux humides : mesure par méthode flash et interprétation*, Thèse, Institut National Polytechnique de Lorraine (1988)
- [Banton et Bangoy 1997] O. BANTON, L. M. BANGOY, *Hydrogéologie, Multiscience environnementale des eaux souterraines*, Presses Univ. Québec, Canada (1997)
- [Bear et Bachmat 1991] J. BEAR, Y. BACHMAT, *Introduction to modeling of transport phenomena in porous media*, 764p, Ed. Kluwer Academic Publishers (1992)
- [Bear et Verruijt 1992] J. BEAR, A. VERRUIJT, *Modeling Groundwater Flow and Pollution*, Ed. D. Reidel, Dordrecht, Holland (1992)
- [Bellin et al. 1992] A. BELLIN, P. SALANDIN, A. RINALDO, *Simulation of dispersion in heterogeneous porous formations : statistics, first-order theories, convergence of computations*, in Water Resources Research, Vol. 28, n°9 (1992)
- [Benet et Jouanna 1983] J.C. BENET, P. JOUANNA, *Non équilibre thermodynamique dans les milieux poreux non saturés avec changement de phase*, in Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 26, n°11, pp. 1585-1595 (1983)
- [Benet et Mouche 1997] L.V. BENET, E. MOUCHE, *Implémentation dans CASTEM2000 d'un modèle de transfert hydrique en milieu poreux non saturé*, Internal communication CEA, n°DMT/97/25 (1997)
- [Benet 2000] L.V. BENET, *ÄSPÖ Hard Rock Laboratory - Task 5. Analyse de l'hydrogéologie consécutif au percement du HRL*, Rapport Socotec, n°AME/BNT-RMP/9.01.036/N1 (2000)
- [Berkowitz et al. 2002] B. BERKOWITZ, J. KLAFTER, R. METZLER, H. SCHER, *Physical pictures of transport in heterogeneous media : Advection-dispersion, random-walk, and fractional derivative formulations*, in Water Resources Research, Vol. 38, n°10, 1191 (2002)

- [Bernard-Michel et al. 2004] G. BERNARD-MICHEL, C. LE POTIER, A. BECCANTINI, S. GOUNAND, M. CHRAIBI, *The Andra Couplex 1 test case : comparisons between finite-element, mixed hybrid element and finite volume element discretizations*, Computational Geosciences, Vol. 8, pp. 187-201 (2004)
- [Bruhat 1968] G. BRUHAT, A. KASTLER, R. VISCHNIEVSKY, J. CHANU, *Thermodynamique*, VI ed., Masson, Paris, 887p (1968)
- [van Cappellen et Wang 1996] P. VAN CAPPELLEN, Y. WANG, *Cycling of iron and manganese in surface sediments : A general theory for the couple transport and reaction of carbon, oxygen, nitrogen, sulfur, iron and manganese*, American Journal of Science, Vol 296, pp. 197-243 (1996).
- [Carey 1996] VAN P. CAREY, *Liquid-Vapor phase-change phenomena*, Hemisphere Publishing Corporation (1996)
- [Carrayrou et al. 2002] J. CARRAYROU, R. MOSÉ, P. BEHRA, *A new efficient algorithm for solving thermodynamic chemistry*, AIChemical Engineering Journal, Vol 48, n° 4, pp. 894-904 (2002).
- [Carrayrou et al. 2004] J. CARRAYROU, R. MOSÉ, P. BEHRA, *Operator splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors*, Journal of Contaminant Hydrology, Vol 68, n° 3-4, pp. 239-268 (2004).
- [Castelier et al 1999] E. CASTELLIER, C. GATABIN, N. TAUVERON, T. LASSABATÈRE, P. LOCOGE, *Dimensionnement de la maquette MASCILIA (Programme REPO)*, Internal communication CEA, n° DCC/SESD 99-27 (1999)
- [Castelier et al 2002] E. CASTELLIER, O. GERBAUX, D. JAMET, P. LOCOGE, P. MAUGIS, *Rapport de synthèse Mascilia phase I : Confrontation expérimentale d'un modèle thermohydraulique en milieu poreux*, Internal communication CEA, n° NT/SAMRA 02-033 (2002)
- [Cederberg et al. 1985] G. CEDERBERG, R. STREET, J. LECKIE, *A groundwater mass transport and equilibrium chemistry model for multicomponent systems* in Water Resources Research, Vol. 21, n° 8, pp. 1095-1104 (1985).
- [Chin et Wang 1992] D.A. CHIN, T. WANG, *An investigation of the validity of first-order stochastic dispersion theories in isotropic porous media*, in Water Resources Research, Vol. 28, n° 6 (1992)
- [Cole et Kevorkian 1981] D.A. CHIN, T. WANG, *Perturbation Methods in Applied Mathematics*, Springer Verlag (1981)
- [Coudrain-Ribstein 1997] A. COUDRAIN-RIBSTEIN, *Transport d'éléments et réactions chimiques dans les aquifères*, PhD thesis, Institut de Géologie, Strasbourg (1988)
- [Courant et al 1928] R. COURANT, K. FRIEDRICHS, H. LEWY, *On the partial difference equations of mathematical physics*, IBM Journal, Mars 1967 (1967), translated from Mathematische Annalen, Vol. 100, pp. 32-74 (1928)
- [Coussy 2004] O. COUSSY - *Poromechanics*. 320p, ed. John Wiley and Sons, ISBN 0-470-84920-7 (2004)

- [Dabbene 1993] F. DABBENE, *Résolution des équations de Darcy par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides*, Internal communication CEA, n° DMT/93/637 (1993)
- [Dabbene et Martin 1994] F. DABBENE, C. MARTIN, *Mise en œuvre des éléments finis mixtes hybrides 3D et application à la résolution des équations de Darcy*, Internal communication CEA, n° DMT/94/565 (1993)
- [Dabbene 1995] F. DABBENE, *Shémas de diffusion-convection en éléments finis mixtes hybrides*, Internal communication CEA, n° DMT/93/637 (1993)
- [De Marsily 1986] G. DE MARSILY, *Quantitative Hydrology, Groundwater Hydrology for Engineers*, Ed. Academic Press (1986)
- [Dabbene 1998] F. DABBENE, *Logiciel TONUS, Partie Multicompartiments : Modélisation physique de la version 2.0*. Internal communication CEA, n° DMT/93/637 (1993)
- [Dagan 1982] G. DAGAN, *Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities. 1 - Conditional simulation and the direct problem*, in *Water Resources Research*, Vol. 18, n° 4 (1982)
- [Dagan 1989] G. DAGAN, *Flow and Transport in porous formation*, Springer-Verlag, New-York (1989)
- [Dagan et Nguyen 1989] G. DAGAN, V. NGUYEN, *A comparison of travel time concentration approaches to modelling transport by groundwater*, in *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 4 (1989)
- [Dangla et Coussy 1996] P. DANGLA, O. COUSSY, *Drainage and drying of deformable porous materials : one dimensional case study*, IUTAM, Symposium on Mechanisms of Granular and Porous Materials Cambridge.
- [Delay et al. 2005] F. DELAY, P. ACKERER, C. DANQUIGNY - *Simulating solute transport in porous or fractured formations using random walk particle tracking : a review*. in *Vadose Zone J.*, Vol. 4, n° 2, pp 360-379 (2005)
- [Desbarats 1992] A. J. DESBARATS, *Spatial averaging of transmissivity in heterogeneous fields with flow toward a well*, in *Water Resources Research*, Vol. 28, n° 3 (1992)
- [Desbarats 1993] A. J. DESBARATS, *Geostatistical analysis of interwell Transmissivity in heterogeneous aquifers*, in *Water Resources Research*, Vol. 29, n° 4 (1993)
- [Dong 1990] ANNE DONG, *Estimation géostatistique des phénomènes régis par des équations aux dérivées partielles*, PhD thesis, ENSMP, Paris, France (1990)
- [Fichoux 1998] LE FICHOUX, *Présentation et utilisation de Castem 2000*, <http://www-cast3m.cea.fr> (1998)
- [Gardiner 1990] C.W. GARDINER, *Handbook of stochastic methods*, Springer-Verlag, 2nd edition (1990)
- [Gelhar 1993] L. GELHAR, *Stochastic subsurface hydrology*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New-Jersey (1993)

- [Grenier 1996] C. GRENIER, *Modélisation stochastique conditionnelle de l'écoulement et du transport particulaire dans un milieu hétérogène bidimensionnel*. Mém. Sc. Terre Univ P. et M. Curie, Paris, n°96-22 (1996)
- [de Groot et Mazur 1963] S.R. DE GROOT, P. MAZUR, *Non-equilibrium thermodynamics*, North Holland Pub., Amsterdam (1963)
- [Hoteit et al. 2002] H. HOTEIT, R. MOSÉ, B. PHILIPPE, PH. ACKERER, J. ERHEL, *The maximum principle violations of the mixed-hybrid finite-element method applied to diffusion equations*, in Int. J. Numer. Meth. Engng, Vol. 55, pp. 1373-1390 (2002)
- [Indelman et Abramovich 1994] P. INDELMAN, B. ABRAMOVICH, *Nonlocal properties of nonuniform averaged flows in heterogeneous media*, in Water Resources Research, Vol. 30, n°12 (1994)
- [Indelman et Rubin 1996a] P. INDELMAN, Y. RUBIN, *Solute transport in nonstationary velocity fields*, in Water Resources Research, Vol. 32, n° 5 (1996)
- [Indelman et al. 1996b] P. INDELMAN, A. FIORI, G. DAGAN, *Steady flow toward wells in heterogeneous formations : Mean head and equivalent conductivity*, in Water Resources Research, Vol. 32, n°7 (1996)
- [Jamet 1998] D. JAMET, *Etude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase*, Thèse, Ecole Centrale de Paris (1998)
- [Joly, Personal Communication] P. JOLY, *A propos du principe du maximum discret pour les problèmes elliptiques et paraboliques*, Personnel Communication, INRIA.
- [Kinzelbach 1988] W. KINZELBACH, *The random walk in pollutant transport simulation*, NATO ASI Series "Groundwater flow and quality modeling", Vol. 224, Series C, Reidel publishing compagny, pp. 227-245 (1996)
- [Kirkner et Reeves 1988] D.J. KIRKNER, H. REEVES, *Multicomponent mass transport with homogeneous and heterogeneous chemical reactions : effect of the chemistry on the choice of numerical algorithm* in Water Resources Research, Vol. 24, pp. 1719-1729 (1988).
- [LaBolle et al. 2000] E.M. LABOLLE, J. QUASTEL, G.E. FOGG, J. GRAVNER, *Diffusion processes in composite porous media and their numerical integration by random walks : Generalized stochastic differential equations with discontinuous coefficients*, in Water Resources Research, Vol. 36, n°3, pp. 651-662 (2000)
- [van der Lee 1997] J. VAN DER LEE, *Modélisation du comportement géochimique et du transport des radionucléides en présence de colloïdes*, PhD thesis, Ecole Nationale des Mines de Paris, Fontainebleau, France (1997)
- [van der Lee et de Windt 2001] J. VAN DER LEE, L. DE WINDT, *Present state and future directions of modeling of geochemistry in hydrogeological systems*, in Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 47, n° 2-4, pp. 265-282 (2001)

- [Landau et Lifshitz 1959] L.D. LANDAU, E.M. LIFSHITZ, *Course of Theoretical Physics, Volume 5 : Statistical physics, 3rd Edition, Part 1*, Pergamon Press (1980)
- [Lenda et Zuber 1970] A. LENDA, A. ZUBER, *Tracer dispersion in groundwater experiments*, Isotope Hydrology 1970 (Proc. Symp. Vienna, 1970), IAEA, Vienna (1970) 619.
- [Le Potier et al. 1998b] C. LE POTIER, E. MOUCHE, A. GENTY, L.V. BENET, F. PLAS, *Mixed Hybrid Finite Element formulation for water flow in unsaturated porous media*, Computational Methods in Water Resources XII. Computational Mechanics Publications, Southampton, UK and Boston, USA (1998)
- [Le Potier 1999a] C. LE POTIER, *Mise en œuvre dans CASTEM2000 d'un modèle thermo-hydraulique en milieu poreux non saturé*, Internal communication CEA, n° SEMT/MTMS/RT/99-003-A (1999)
- [Le Potier 1999b] C. LE POTIER, *Application des Eléments Finis Mixtes Hybrides à un modèle de transferts hydriques et thermiques en milieu poreux non saturé*, Onzième Séminaire de Mécanique des Fluides Numérique - Ecoulement de fluides compressibles. CEA Saclay - IPSN (1999)
- [Lessof et al. 1982] S.C. LESSOF, P. INDELMAN, G. DAGAN, *A note on the influence of a constant velocity boundary condition on flow and transport in heterogeneous formations*, in Water Resources Research, Vol. 36, n°10, pp. 3095-3101 (2000)
- [Magnaud 1990] J.P. MAGNAUD, *Schémas en temps*, Cours IPSI, Méthodes numériques en mécanique des fluides et applications industrielles, 15-18 Mai 1990 (1990)
- [Mantoglou et Wilson 1982] A. MANTOGLOU, J.L. WILSON *The turning bands method for simulation of random fields using line generation by a spectral method*, in Water Resources Research, vol.18, No.5, pp.1379-1394, 1982.
- [Martinez et al.] M.J. MARTINEZ, P.L. HOPKINS, J.N. SHADID, *LDRD Final Report : Physical simulation of nonisothermal multiphase multicomponent flow in porous media*, Internal communication Sandia, SAND97-1766 UC-403 (1997)
- [Matheron 1973] G. MATHERON, *The intrinsic random functions and their applications*, in Advances in Applied Probability, Vol. 5, n°2, pp. 439-468 (2003)
- [Maugis 1995] P. MAUGIS, A. STIETEL, *Modélisation préliminaire du terme source stockage direct*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/95-647 (1995)
- [Maugis 1997a] P. MAUGIS, *Modèle stochastique de transport en écoulement uniforme dans un milieu hétérogène : validation de l'hypothèse gaussienne et influence des conditions aux limites*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/97-416 (1997)
- [Maugis 1997b] P. MAUGIS, *Non uniform steady flow in stationary heterogeneous media : dispersion analysis*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/97-495 (1997)

- [Maugis 2002] P. MAUGIS, *Avancement des travaux sur le projet Reseal II*, Internal communication CEA, n°SEMT/MTMS/RT/02-025/A (2002)
- [Maugis et Le Potier 1999] P. MAUGIS, C. LE POTIER, *Simulation du fonctionnement de la maquette Mascilia : Etablissement du modèle thermo-hydraulique préliminaire, de la modélisation numérique et calculs 3D en situation nominale*, Internal communication CEA, n°DMT/SEMT/MTMS/RT/99-018/B (1999)
- [Maugis et Mouche 1998] P. MAUGIS, E. MOUCHE, *Influence of boundary conditions on tracer dispersion in an aquifer*, Proceedings of IAMG'98 (1998)
- [Maugis et al. 2002b] P. MAUGIS, E. MOUCHE, L. DEWIÈRE, *Analysis of displacement variances in stochastic nonuniform flows by means of a first order analytical model and comparison with Monte-Carlo simulations*, in Transport in Porous Media, Vol. 47, pp :1,27 (2002)
- [Mishra 1997] A.K. MISHRA, *Reactive transport in a chemically and physically heterogeneous porous medium : effect of linear kinetic sorption*, PhD thesis, New Mexico Institute of Mining and Technology (1997)
- [Mishra et Gutjahr 1997] A.K. MISHRA, A. GUTJAHR, *Transverse dispersion in a stratified aquifer : Effect of kinetic sorption*, in Proc. IAMG 97, ed. V. Pawlowsky-Glahn, Barcelona (1997)
- [Monavon 1990] A. MONAVON, *Modèles stochastiques d'écoulement d'un fluide et de transport d'un contaminant passif dans un massif poreux, hétérogène et saturé*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/90-352 (1990).
- [Monavon 1993] A. MONAVON, *Théorie asymptotique du transport en milieu hétérogène non diffusif*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/93-632 (1993)
- [Moroni et Cushman 2001] M. MORONI, J.H. CUSHMAN, *Three-dimensional particle tracking velocimetry studies of the transition from pore dispersion to Fickian dispersion for heterogeneous media*, in Water Resources Research, Vol. 37, n° 4, pp. 873-884 (2001)
- [Morse et Feshbach 1953] P.M. MORSE, H. FESHACH, *Methods of theoretical physics*, McGraw-Hill Book Company, New-York, US, LCCCN 52-11515 (1953)
- [Mosé 1990] R. MOSÉ, *Application de la méthode des éléments finis mixtes hybrides et de la marche au hasard à la modélisation de l'écoulement et du transport de masse en milieu poreux*, PhD thesis, ENITRTS (1990)
- [Mouche et Rouzier 1993] E. MOUCHE, P. ROUZIER, *Intégration du modèle stochastique d'écoulement dans un milieu anisotrope. Reformulation du modèle en fonction du Log de la perméabilité, calcul des variances et application au cas d'un aquifère du bassin parisien.*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/93-638 (1993)
- [Mouche et Lemaire 1995] E. MOUCHE S. LEMAIRE, *Simulation numérique du transport de particules dans un milieu poreux hétérogène bidimensionnel.*, Internal communication CEA, n°DRN/DMT/95-560 (1995)

- [*Mouche et al. 1996*] E. MOUCHE, E. TREILLE, L. DEWIERE, *An investigation of validity of stochastic flow models in nonuniform average flows*, Proceedings of Computational Methods in Water Resources XI : 'Volume 2 : Computational methods in surface flow and transport problems', Computational Mechanics Publications (1996)
- [*Mouche et Mangin 1986*] E. MOUCHE, J.P. MANGIN, *Diffusion-Filiation : Résolution semi-analytique pour des éléments à courte période*, Internal communication CEA, n°SESD/86-35 (1986)
- [*Nassar et Horton 1989*] I.N. NASSAR, R. HORTON, *Water transport in unsaturated nonisothermal salty soil, II, theoretical development*, in Soil Science Society Am. Journal, Vol. 53, p1330-1337 (1989)
- [*Nitao et Bear 1996*] J.J. NITAO, J. BEAR, *Potentials and their role in transport in porous media*, in Water Resources Research, Vol. 32, n°2 (1996)
- [*Onsager 1931*] L. ONSAGER, , in Phys. Rev., Vol. 37, pp. 405 (1931)
- [*Osnes 1995*] H. OSNES - *Stochastic analysis of head spatial variability in bounded rectangular heterogeneous aquifers*, in Water Resources Research, Vol. 31, n°12 (1995)
- [*Padilla et al. 1999*] I.Y. PADILLA, T.-C. J YEH, M.H. CONKLIN, *The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media*, in Water Resources Research, Vol. 35, n°11 (1999)
- [*Philip et de Vries 1957*] J.R. PHILIP, D.A. DE VRIES, *Moisture movement in porous materials unde temperature gradients*, Eos Trans. AGU, n°38, p222-232 (1957)
- [*Pollock 1986*] D.W. POLLOCK, *Simulation of fluid flow and energy transport processes associated with high-level radioactive waste disposal in unsaturated alluvium*, in Water Resources Research, Vol. 22, n°5 (1986)
- [*Pollock 1988*] D.W. POLLOCK, *Semianalytical computation of path lines for finite-difference models*, in Groundwater, Vol. 26, n°6, pp.743-750 (1988)
- [*Prigogine 1947*] I. PRIGOGINE *Étude thermodynamique des phénomènes irréversibles*, Dunod (1947)
- [*Roberts 1991*] J.E. ROBERTS, J.M. THOMAS, *Mixed and hybrid methods*, *Handbook of numerical analysis*, Vol. 2, P.G. Ciarlet and J.L. Lions Ed., North Holland, p. 523 (1991)
- [*Roth 1995*] C. ROTH, *Contribution de la géostatistique à la résolution du problème inverse en hydrogéologie*. Thèse, 241. Editions BRGM (1995)
- [*Rubin et Dagan 1987*] Y. RUBIN, G. DAGAN, *Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow* in Water Resources Research, Vol. 23, n°7 (1987).
- [*Rubin et Dagan 1988*] Y. RUBIN, G. DAGAN, *Stochastic of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers. 1. Constant head boundaries*, in Water Resources Research, Vol. 24, n°10 (1988)

- [Rubin et Dagan 1989] Y. RUBIN, G. DAGAN, *Stochastic of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers. 2. Impervious boundary*, in Water Resources Research, Vol. 25, n° 4 (1989)
- [Rubin 1990] Y. RUBIN, *Stochastic modeling of macrodispersion in heterogeneous porous media*, in Water Resources Research, Vol. 26, n° 1 (1990)
- [Rubin 1991] Y. RUBIN, *Prediction of tracer plume migration in disordered porous media by the method of conditional probabilities*, in Water Resources Research, Vol. 27, n° 6 (1991)
- [Rubin and Seong 1994] Y. RUBIN, K. SEONG, *Investigation of flow and transport in certain cases of nonstationary conductivity fields*, in Water Resources Research, Vol. 30, n° 11 (1994)
- [Saaltink 2001] M. W. SAALTINK, J. CARRERA, C. AYORA, *On the behavior of approaches to simulate reactive transport*, in Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 47, n° 2-4, pp. 213-235 (2001)
- [Sánchez-Vila 1997] X. SÀNCHEZ-VILA, *Radially convergent flow in heterogeneous porous media* in Water Resources Research, Vol. 33, n° 7 (1997).
- [Schafer-Perini et Wilson 1991] A.L. SCHAFER-PERINI, J.L. WILSON, *Efficient and accurate front tracking for two-dimensional groundwater flow models*, in Water Resources Research, Vol. 27, n° 7, pp 1471-1485 (1991)
- [Schmidt et Grigull 1989] E. SCHMIDT, U. GRIGULL, *Properties of water and steam in SI-units. 0-800 degree C; 0-1000 Bars*, Springer Verlag, 1989
- [Semra 1994] K. SEMRA, *Modélisation tridimensionnel du transport d'un traceur en milieu poreux saturé hétérogène : Evaluation des théories stochastiques*, PhD thesis, Univ. Louis Pasteur, Strasbourg, France (1994)
- [Seong and Rubin 1999] K. SEONG, Y. RUBIN, *Field investigation of the Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) site (New Mexico) using a nonstationary stochastic model with a trending hydraulic conductivity field*, in Water Resources Research, Vol. 35, n° 1 (1999)
- [Serrano 1992] S. SERRANO, *The form of the dispersion equation under recharge and variable velocity, and its analytical solution*, in Water Resources Research, Vol. 28, n° 7 (Jul. 1992)
- [Shen 1997] H. SHEN, N.P. NIKOLAIDIS, *A direct substitution method for multi-component solute transport in ground water*, in Ground Water, Vol. 35, n° 1, pp. 67-78 (1997)
- [Smith et Freeze 1979] L. SMITH, R.A. FREEZE, *Stochastic analysis of steady state groundwater flow in a bounded domain. 2. two-dimensional simulations*, in Water Resources Research, Vol. 15, n° 6, pp. 1543-1559 (1979)
- [Steeffel et Lasaga 1994] C.I. STEEFEL, A.C. LASAGA, *A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems*, in American Journal of Science, Vol. 294, pp. 529-592 (1994)

- [*Steeffel et MacQuarrie 1996*] C.I. STEEFEL, K.T.B. MACQUARRIE, *Approaches to modeling reactive transport in porous media*, in *Reactive Transport in Porous Media*, Rev. Mineral, Vol. 34, pp. 83-125 (1996)
- [*Tomkins et al. 1994*] J.A. TOMKINS, K.C. GAN, H.S. WHEATER, F. HIRANO, *Prediction of solute dispersion in heterogeneous porous media : effects of ergodicity and hydraulic conductivity discretisation*, in *J. Hydrology*, Vol. 159, pp. 105-123 (1994)
- [*Tompson et al. 1987*] A.F.B. TOMPSON, E.G. VOMORIS, L.W. GELHAR, *Numerical simulation of solute transport in randomly heterogeneous porous media : Motivation, model development, and application*, Rep. UCID-21281, Lawrence Livermore Natl. Lab., Livermore, Calif., (1987)
- [*Uffink 1985*] G.J.M. UFFINK, *A random walk method for the simulation of macro-dispersion in a stratified aquifer*, in *Relation of groundwater quality and quantity*, IAHS publ., n° 146, pp. 103-114 (1985)
- [*Uffink 1990*] G.J.M. UFFINK, *Analysis of dispersion by the random walk method*, PHD Thesis, Tech. univ. Delft, 150p (1990)
- [*UN 2003*] , *Water for People - Water for Life*, The United Nations World Water Development Report, 576p (2003)
- [*UPC 1997*] UPC-DIT - *Reseal Project. Large scale test : scoping calculations schemes using FoCa clay parameters*. UPC, (Nov. 1997)
- [*Varga 1962*] R.S. VARGA, *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall ed. (1962)
- [*Vauclin et al 1979*] M. VAUCLIN, R. HAVERKAMP, G. VACHAUD, *Numerical resolution of a non linear diffusion equation*, Presses Universitaires de Grenoble (1979)
- [*Verpeaux et al 1988*] P. VERPEAUX, T. CHARRAS, A. MILLARD, *CASTEM 2000 une approche moderne du calcul des structures*, Calcul des structures et intelligence artificielle (Fouet J.M., Ladevèze P., Ohayon R., Eds), Pluralis, 1988, p. 261-271 (1988)
- [*Volckaert et al. 1996a*] G. VOLCKAERT, F. BERNIER, E. ALONSO, A. GENS, J. SAMPER, M. VILLAR, P.L. MARTIN-MARTIN, J. CUEVAS, R. CAMPOS, H. THOMAS, C. IMBERT, V. ZINGARELLI, *Thermal-hydraulic-mechanical and geochemical behavior of the clay barrier in radioactive waste repositories (model development and validation) - Final Report*, Luxembourg : Office for Official Publications of the European Communities, Nuclear Science and Technology series, EUR 16744 EN, ISBN 92-827-5743-9 (1996)
- [*Winberg et al. 2000*] A. WINBERG, P. ANDERSSON, J. HERMANSON, J. BYEGÅRD, V. CVETKOVIC, L. BIRGERSSON, *Åspö Hard Rock Laboratory, Final report of the first stage of the tracer retention understanding experiments*, SKB Technical report, TR-00-07 (2000)
- [*Yeh et Tripathi 1989*] G.-T. YEH, V. TRIPATHI, *A critical evaluation of recent developments of hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components* in *Water Resources Research*, Vol. 25, n° 1, pp. 93-108 (1989).

- [Yeh et Tripathi 1991] G.-T. YEH, V. TRIPATHI, *A model for simulating transport of reactive multispecies components : model development and demonstration* in Water Resources Research, Vol. 27, n° 12, pp. 3075-3094 (1991).
- [Zhang et Federico 1998] D. ZHANG, V. DI FEDERICO, *Solute transport in three-dimensional heterogeneous media with a gaussian covariance of log hydraulic conductivity*, in Water Resources Research, Vol. 34, n° 8, pp. 1929-1934 (1998)
- [Zysset et al. 1994] A. ZYSSET, F. STAUFFER, T. DRACOS , *Modeling of chemically reactive groundwater transport* in Water Resources Research, Vol. 30, pp. 2217-2228 (1994).

Articles publiés relatifs à ces travaux

- **P. Maugis**, E. MOUCHE, *Influence of boundary conditions on tracer dispersion in an aquifer*, Proceedings of IAMG'98 (1998)
- **P. Maugis**, E. MOUCHE, L. DEWIÈRE, *Analysis of displacement variances in stochastic nonuniform flows by means of a first order analytical model and comparison with Monte-Carlo simulations*, in Transport in Porous Media, Vol. 47, pp. 1-27 (2002)